

# **Estudio de núcleos exóticos con teorías más allá de campo medio**

*Memoria que presenta para optar al grado de*

*Doctor en Ciencias Físicas*

**Tomás Raúl Rodríguez Frutos**

*Dirigida por el profesor*

**José Luis Egido de los Ríos**



Departamento de Física Teórica  
Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma de Madrid  
Septiembre de 2007



*A mi sobrina María,  
a mi tía Petra  
y a mi abuelo Leandro*



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
<b>2. Modelos nucleares</b>	<b>9</b>
2.1. Introducción . . . . .	9
2.2. Modelo de Capas (SM) . . . . .	11
2.3. Métodos de campo medio autoconsistente (SCMF) . . . . .	12
<b>3. Interacciones efectivas fenomenológicas en el medio nuclear</b>	<b>17</b>
3.1. Interacción de Skyrme . . . . .	18
3.2. Interacción de Gogny . . . . .	21
3.3. Interacciones relativistas . . . . .	23
<b>4. Método de Hartree-Fock-Bogoliubov y sus extensiones</b>	<b>31</b>
4.1. El método de Hartree-Fock-Bogoliubov . . . . .	31
4.2. Métodos más allá de campo medio . . . . .	36
4.2.1. Método de la coordenada generadora . . . . .	37
4.2.2. Restauración de las simetrías . . . . .	38
<b>5. Estudio de las correlaciones de apareamiento</b>	<b>43</b>
5.1. Conceptos generales de la proyección a buen número de partículas . . . . .	46
5.1.1. Energía proyectada . . . . .	47
5.1.2. Divergencias en la energía proyectada . . . . .	50
5.1.3. Término dependiente de la densidad . . . . .	51
5.2. Métodos de proyección a buen número de partículas . . . . .	52
5.2.1. Hartree-Fock-Bogoliubov Proyectado (PAV) . . . . .	52
5.2.2. Variación Después de la Proyección (VAP) . . . . .	53
5.2.3. Lipkin-Nogami (LN) y Lipkin-Nogami Proyectado (PLN) . . . . .	53
5.2.4. Variación Después de la Proyección Restringida (RVAP) . . . . .	55
5.2.5. Justificación del método de Lipkin-Nogami . . . . .	56
5.3. Comparaciones numéricas . . . . .	58

5.3.1.	Hamiltonianos de apareamiento reducido . . . . .	58
5.3.2.	Correlaciones de apareamiento con la interacción de Gogny . . . . .	70
5.4.	Resumen . . . . .	74
<b>6.</b>	<b>Restauración de la simetría rotacional y el método de la coor- denada generadora</b>	<b>79</b>
6.1.	Restauración simultánea de las simetrías del número de partícu- las y rotacional . . . . .	80
6.1.1.	Proyección a buen momento angular . . . . .	80
6.1.2.	Energía proyectada . . . . .	82
6.1.3.	Término dependiente de la densidad . . . . .	85
6.1.4.	Simetría axial . . . . .	86
6.1.5.	Métodos de proyección a buen momento angular . . . . .	87
6.1.6.	Estudio de las superficies de energía potencial proyec- tadas a $N, Z, J$ . . . . .	89
6.2.	Conceptos generales del método GCM . . . . .	93
6.2.1.	Ecuación de Hill-Wheeler-Griffin . . . . .	94
6.2.2.	Término dependiente de la densidad . . . . .	97
6.2.3.	Comparaciones numéricas . . . . .	97
6.3.	Resumen . . . . .	106
<b>7.</b>	<b>Estudio de los cierres de capas en núcleos ricos en neutrones</b>	<b>111</b>
7.1.	Estudio de los cierres de capas $N = 32, N = 34$ en núcleos ricos en neutrones . . . . .	115
7.2.	Estudio del cierre de capas $N = 40$ en los isótopos del Cromo .	124
7.3.	Estudio del cierre de capas $N = 28$ en los isótopos del Silicio .	129
7.4.	Resumen . . . . .	134
<b>8.</b>	<b>Estudio de las transiciones de forma en los isótopos de neo- dimio</b>	<b>141</b>
8.1.	Estudio de las superficies de energía potencial . . . . .	143
8.2.	Análisis espectroscópico con simetría axial . . . . .	148
8.3.	Resumen . . . . .	156
<b>9.</b>	<b>Conclusiones generales y perspectivas</b>	<b>161</b>
<b>A.</b>	<b>Cálculo de solapes GCM</b>	<b>167</b>
<b>B.</b>	<b>Cálculo de valores esperados con funciones GCM</b>	<b>175</b>
B.1.	Parte GCM . . . . .	175
B.2.	Parte de la proyección a buen momento angular . . . . .	176

## ÍNDICE GENERAL

---

B.3. Parte de la proyección al número de partículas . . . . .	179
B.3.1. Norma . . . . .	180
B.3.2. Operador a un cuerpo . . . . .	180
B.3.3. Hamiltoniano . . . . .	181
<b>C. Probabilidades de transición</b>	<b>185</b>
C.1. Parte GCM . . . . .	187
C.2. Parte de la proyección a buen momento angular . . . . .	187
C.3. Transiciones cuadrupolares eléctricas. Momento cuadrupolar espectroscópico . . . . .	190
C.4. Transiciones dipolares magnéticas. Momento dipolar magnético	192
<b>D. Simetrías autoconsistentes</b>	<b>193</b>
D.1. Base triaxial . . . . .	194
D.2. Estructura de bloques de las matrices $U, V$ . . . . .	195
D.3. Estructura de bloques de la matriz densidad y tensores de apareamiento . . . . .	197
<b>Agradecimientos.</b>	<b>203</b>
<b>Índice de figuras.</b>	<b>205</b>
<b>Índice de tablas.</b>	<b>213</b>





# Capítulo 1

## Introducción

El desarrollo de nuevas técnicas experimentales en Física Nuclear como los Haces de Iones Radiactivos o los espectrómetros de rayos  $\gamma$  en  $4\pi$  de alta eficiencia ha permitido durante los últimos años el estudio de la estructura nuclear en sistemas exóticos, entendiendo como tales aquellos núcleos lejos del valle de la estabilidad ( $|N - Z|$  grande) o núcleos superpesados. Dichas técnicas han permitido también estudiar los núcleos del valle de la estabilidad y sus proximidades en condiciones exóticas, es decir, en condiciones de muy alta energía de excitación o en condiciones de muy alto momento angular total ( $I \sim 40 - 80\hbar$ ). Todo ello está revelando aspectos fundamentales de la estructura nuclear como, por ejemplo, la determinación de las líneas de goteo (*driplines*), la aparición de halos y pieles de neutrones en núcleos ligeros, el debilitamiento de los números mágicos o aparición de otros nuevos, la coexistencia y transiciones de forma, etc.

Esta gran cantidad de resultados experimentales demanda el desarrollo de herramientas teóricas adecuadas que permitan su comprensión. La gran mayoría de métodos empleados para investigar teóricamente estos sistemas se basan en la aproximación de campo medio. Dicha aproximación considera el núcleo como un sistema de partículas o cuasipartículas que no interactúan entre sí y que están sometidas a un potencial externo promedio que liga el sistema. Este potencial puede calcularse de manera autoconsistente a partir de las interacciones efectivas nucleares como en los métodos de Hartree-Fock (HF) y Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB).

La aproximación de campo medio autoconsistente da por sí misma buenos resultados en la descripción de las propiedades macroscópicas de los núcleos y su éxito se debe en parte a que se incluye una gran cantidad de correlaciones con unas funciones de onda muy sencillas. Todo ello se consigue gracias a la

ruptura de las simetrías del hamiltoniano. Así, en los cálculos que se basan en la teoría de HFB se pueden romper, por ejemplo, la invariancia bajo traslaciones, la simetría de paridad espacial, la simetría de inversión temporal, la invariancia bajo rotaciones y la simetría del número de partículas. Sin embargo, para describir adecuadamente un sistema finito como el núcleo atómico se debe ir más allá de la aproximación de campo medio y restaurar dichas simetrías. Además, se puede mejorar aún más la descripción del sistema de muchos cuerpos si se permiten superposiciones de funciones de onda con las simetrías restauradas y que dependan de una serie de parámetros internos como, por ejemplo, deformaciones.

Este trabajo se enmarca precisamente en el desarrollo de los métodos que van más allá de la aproximación de campo medio autoconsistente con interacciones fenomenológicas efectivas. En concreto, en esta tesis se ha implementado por primera vez el Método del Generador de Coordenadas con funciones de onda proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular con la interacción de Gogny. Además, las funciones de onda de tipo producto intrínsecas, que están en la base del generador de coordenadas, se hallan mediante el Método de la Variación Después de la Proyección a buen número de partículas (*Variation After Projection*, VAP). Por tanto, se obtienen dos importantes mejoras metodológicas con respecto a los modelos existentes:

1. El uso del método VAP a buen número de partículas para hallar las funciones de onda intrínsecas de tipo producto del sistema de muchos cuerpos, frente a otras aproximaciones, como el HFB estándar o el método de Lipkin-Nogami (LN).
2. La realización de la proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular axial, frente a la proyección sólo a buen momento angular axial existente hasta el momento con la interacción de Gogny. Para poder llevar a cabo esta proyección se ha escrito un código de ordenador nuevo basado en las expresiones que se presentarán a lo largo de la memoria.

Como aplicación de los métodos más allá de campo medio propuestos en este trabajo, por una parte, se ha realizado un análisis detallado de las técnicas de proyección de funciones de onda de tipo producto y se han desarrollado aproximaciones como la Variación Después de la Proyección Restringida (RVAP). Por otro lado, estos métodos se han aplicado al estudio de problemas candentes en el campo de la Estructura Nuclear de baja energía, como la aparición o degradación de los cierres de capas en núcleos ligeros ricos en

---

neutrones, o las transiciones de forma y el análisis de las nuevas simetrías críticas en los isótopos de neodimio.

La presente memoria está estructurada de la siguiente manera. En el siguiente capítulo introduciremos las diferentes aproximaciones teóricas que se emplean para resolver el problema de muchos cuerpos nuclear dependiendo de la región de la tabla de núcleos que se quiera estudiar. De esta manera situaremos los métodos que se describen en este trabajo en el contexto adecuado. En el capítulo 3 se resumen las principales interacciones fenomenológicas efectivas que se usan en los cálculos de campo medio autoconsistente y sus extensiones. Estos métodos de resolución del problema de muchos cuerpos nuclear se introducen en el capítulo 4 (HFB, Generador de coordenadas y técnicas de proyección). El capítulo 5 está dedicado al estudio de las correlaciones de apareamiento en el marco de la proyección a buen número de partículas. Posteriormente, se describe la restauración simultánea de la simetría del número de partículas y rotacional con funciones de onda de tipo producto y la implementación del método del generador de coordenadas en el capítulo 6. Los estudios efectuados con el método propuesto acerca de los posibles cierres de capas en los núcleos ligeros ricos en neutrones así como de las transiciones de forma en los isótopos del neodimio se presentan en los capítulos 7 y 8 respectivamente. Las conclusiones generales y perspectivas para un trabajo futuro que extienda y mejore las técnicas propuestas en esta tesis se presentan en el capítulo 9. Finalmente, en los apéndices se tratarán en detalle aspectos técnicos relacionados con el cálculo de observables con funciones de onda proyectadas.



# Capítulo 2

## Modelos nucleares

### 2.1. Introducción

El trabajo que se presenta en esta memoria de tesis se enmarca dentro del campo de la Física Nuclear Teórica. Si despreciamos los grados de libertad internos de los nucleones, es decir, los *quarks*, el núcleo atómico es un sistema compuesto por protones y neutrones que interaccionan fuertemente entre sí. El estudio microscópico de dichos sistemas requiere, por un lado, del conocimiento de las interacciones existentes entre los nucleones y, por otro, de un método adecuado para la resolución de un problema de muchos cuerpos cuánticos. En Física Nuclear dichos aspectos están íntimamente relacionados entre sí y, dependiendo de los sistemas (materia nuclear o distintas regiones de la tabla de núcleos) y propiedades (saturación, energías de ligadura, espectros de excitación, barreras de fisión, etc.) que se quieran investigar se escoge el método y la interacción más adecuados para el problema concreto.

Siguiendo este criterio se pueden delimitar distintas zonas de la tabla de núcleos dependiendo de la aplicabilidad de los modelos (véase figura (fig. 2.1)). Así, los sistemas compuestos de pocos nucleones, típicamente con números másicos  $A \leq 12$ , se estudian usando métodos *ab initio* tales como las técnicas de Faddeev-Yakobovsky [2, 3], el método de Monte Carlo Variacional (*Variational Monte Carlo*, *VMC*) [4, 5] o el Monte Carlo con funciones de Green (*Green's function Montecarlo*, *GPMC*) [5, 6]. En dichos cálculos se emplean interacciones nucleares realistas *desnudas*. Para hallar dichos potenciales primero se asume una parametrización de la interacción, bien fenomenológica (Reid, Argonne [7], Nijmegen [8], Bonn [9, 10], Paris [11], etc.) o bien basada en la cromodinámica cuántica (*Quantum Chromodynamics*, *QCD*) dentro del marco de las teorías de campos quirales efectivas

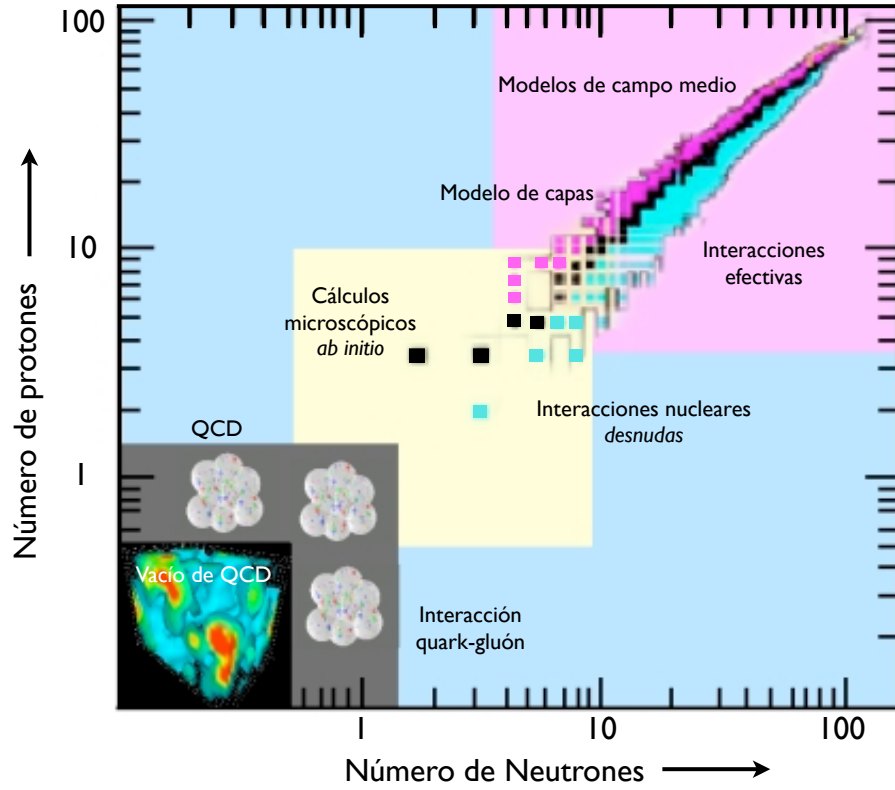


Figura 2.1: Tabla de núcleos dividida en distintas regiones dependiendo de los métodos que se emplean para describir sus propiedades. Véase el texto para más detalles. La figura está adaptada de la referencia [1].

(*Chiral Effective Field Theories,  $\chi EFT$* ) [12, 13, 14], que incluya las propiedades de simetría y dependencias en espín e isospín que debe tener la interacción nuclear. Posteriormente se ajustan los parámetros a los valores experimentales de la energía de ligadura del deuterón y a los desfases medidos en colisiones nucleón-nucleón en los distintos canales de espín e isospín. Otra alternativa dentro de este tipo de cálculos *ab initio* con interacciones nucleares desnudas, a las que se les hace una regularización previa, es el denominado modelo de capas sin *core* (*No Core Shell Model, NCSM*) con el que también se obtienen resultados exactos para estos sistemas de pocos cuerpos [15, 16]. De hecho, del desacuerdo de las predicciones teóricas con los datos experimentales se ha concluido la necesidad de incluir interacciones nucleares desnudas a más de dos cuerpos [17, 18, 19].

Los principales problemas de los métodos *ab initio* con interacciones realistas provienen de la imposibilidad de aplicar dichas técnicas al estudio de

## 2.2. Modelo de Capas (SM)

---

núcleos más pesados. Por un lado, los potenciales nucleares desnudos tienen una parte repulsiva a cortas distancias casi divergente que imposibilita su uso en cálculos que emplean técnicas de resolución de problemas de muchos cuerpos (tipo Hartree-Fock). Por otra parte, el número de grados de libertad (y el espacio de Hilbert asociado) crece enormemente a medida que se incluyen más nucleones y el cálculo *ab initio*, ya muy costoso computacionalmente para núcleos ligeros, se hace inaccesible para núcleos más pesados. Por tanto, para el estudio microscópico de prácticamente la totalidad de los núcleos se tienen que emplear otro tipo de aproximaciones que involucren otro tratamiento de las interacciones nucleón-nucleón.

Los modelos microscópicos más usados para estudiar las propiedades de los núcleos atómicos fuera de los sistemas con pocos nucleones se pueden dividir en dos grandes grupos, el modelo de capas (*Interacting Shell Model, SM*) [20, 21] y el método de campo medio autoconsistente (*Self-Consistent Mean Field, SCMF*) [22]. Ambos grupos comparten dos aspectos importantes. El primero de ellos es que, en sus versiones más básicas, aproximan el sistema autoligado de nucleones que interaccionan entre sí a un sistema de fermiones libres cuyas partículas están confinadas por un potencial externo generado por el resto de partículas dentro del núcleo. Es decir, se hace una aproximación de campo medio o de partícula independiente, motivada por la evidencia experimental de los números mágicos. El segundo aspecto es que en ambos grupos de modelos se tiene en cuenta que en el medio nuclear gran parte de los estados accesibles en la interacción nucleón-nucleón desnuda están ocupados por otros nucleones. Este hecho hace que la interacción sea más suave a cortas distancias y da sentido a las aproximaciones de campo medio. En consecuencia, tanto el SM como el SCMF utilizan interacciones nucleares *efectivas*. Sin embargo existen también diferencias que hacen que unos modelos u otros sean más adecuados para describir determinadas propiedades y regiones de la tabla de núcleos.

## 2.2. Modelo de Capas (SM)

El SM está basado en el uso de los estados de oscilador armónico para definir una base de determinantes de Slater en la que se diagonaliza el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear. Por tanto, en principio este método daría la solución exacta del problema. Sin embargo, el cálculo se hace intratable a medida que crece el número de nucleones y se tiene que restringir el

espacio de Hilbert aprovechando generalmente la estructura de niveles que dan los números mágicos. De esta manera se divide el sistema en un *core*, formado por nucleones que están llenando completamente capas de oscilador, y en el denominado espacio de valencia. Este último está formado por los niveles correspondientes a la capa inmediatamente superior (espacios  $0\hbar\omega$ ) y en ocasiones por estados intrusos de capas superiores. Es precisamente en el espacio de Hilbert proporcionado por el espacio de valencia donde se resuelve el problema. Dependiendo de la región de la tabla de núcleos que se quiera estudiar se escoge un espacio de valencia y, adecuada a dicho espacio, una interacción efectiva.

En el modelo de capas la interacción nuclear aparece en forma de elementos de matriz entre los estados del espacio de valencia. El cálculo de dichos elementos de matriz requiere de ajustes a datos experimentales, principalmente a las energías de partícula independiente provenientes de las energías de excitación de núcleos casi mágicos con una partícula o un hueco fuera de capa. En la Tabla 2.1 se resume el estado actual de las interacciones, sus correspondientes espacios de valencia y el intervalo de masas donde se usan en los cálculos dentro del modelo de capas [20, 21].

Aunque el SM es probablemente el modelo que describe mejor la estructura nuclear a baja energía de excitación en núcleos ligeros, presenta ciertos inconvenientes que no pueden ser ignorados. En primer lugar, su rango de aplicación se reduce a regiones de la tabla de núcleos donde la dimensión del espacio de valencia sea computacionalmente asequible. Esto descarta su uso en los núcleos que tienen muchos nucleones fuera de capa en los dos canales de isospín así como en núcleos pesados donde el número de niveles cerca de la energía de Fermi es muy grande. Por otra parte, como se puede deducir de la tabla 2.1, la dependencia de la interacción con el espacio de valencia y el número de interacciones existentes, que en ocasiones dan resultados distintos, hace que no sea un método universal y que su poder predictivo se vea afectado.

### 2.3. Métodos de campo medio autoconsistente (SCMF)

En los métodos de campo medio autoconsistente (SCMF) se hace uso del principio variacional para encontrar el hamiltoniano de (cuasi)partícula independiente óptimo del problema de muchos cuerpos nuclear. Para ello se usa el método de Hartree-Fock (HF) y su generalización, el método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) con interacciones efectivas 'universales' [24]. Es decir, se



### 2.3. Métodos de campo medio autoconsistente (SCMF)

Espacio de valencia	Interacciones Efectivas	Número másico $A$
$p$	TBME	5-16
	PJT	5-16
	PJP	5-16
	POT	8-16
	PWBT	10-16
$sd$	USD	16-40
	SDPOTA	16-40
$pf$	FPMG	40-50
	FPD6	40-50
	KB3	40-50
	KB3G	40-60
	GXFP	40-60
$s - p - sd - pf$	MK	10-20
	WBP	10-20
	WBT	10-20
$sd - pf$	WBMB	$N \sim 20$
	SDPF-RN	$N \sim 20$
	Utsuno et al.	$N \sim 20$
	Dean et al.	$N \sim 20$
$r_3 - g_{9/2}(d_{5/2})$	GCN28-50	$\sim 76 - 82$
$r_4 - h_{11/2}$	GCN50-82	$\sim 100 - 140$

Tabla 2.1: Espacios de valencia e interacciones efectivas correspondientes empleadas en los cálculos actuales del Modelo de Capas. Tabla adaptada de Refs. [20, 21, 23]

usan las mismas fuerzas para describir propiedades en cualquier región de la tabla de núcleos, tanto núcleos ligeros como pesados, estables o exóticos. Como veremos más adelante, para que dichas fuerzas sean capaces de dar resultados adecuados, actualmente se emplean interacciones dependientes de la densidad nuclear y ajustadas a propiedades globales como las energías de ligadura y radios de una serie de núcleos estables a lo largo de la tabla de núcleos. Además, no hay distinción entre nucleones de valencia y el resto de nucleones ya que los espacios de configuración que se usan son muy grandes.

En estos métodos, la función de onda que describe el sistema de muchos cuerpos es un producto de funciones de onda de una (cuasi)partícula. Para que el espacio variacional construido con este tipo de funciones de onda sencillas sea lo mayor posible se admite la ruptura de las simetrías del hamiltoniano como, por ejemplo, el número de partículas, la invariancia ba-

jo traslaciones, la invariancia rotacional, paridad, etcétera. Esto produce en muchos casos la ruptura espontánea de dichas simetrías y permite describir desde un punto de vista microscópico efectos colectivos como la superfluidez nuclear (ruptura del número de partículas) o la aparición de deformación y bandas rotacionales (ruptura de invariancia rotacional), por mencionar los más relevantes.

Sin embargo, aunque este mecanismo proporciona soluciones aproximadas de gran calidad con unas funciones de onda sencillas, en muchos sistemas esta aproximación es muy pobre, especialmente si la violación de las simetrías es pequeña o nula. A pesar de ello, los métodos SCMF tienen la ventaja de que pueden servir como punto de partida para extensiones que incluyan parte de la interacción residual que no entra en la descripción de campo medio, y que consideran la función de onda final como una combinación lineal de funciones de onda de tipo producto. Estos procedimientos son los denominados Métodos Más Allá de la Aproximación de Campo Medio (*Beyond-Mean-Field Approximation, BMFA*) entre los que destacamos la restauración de las simetrías o el Método de la Coordenada Generadora o Generatriz (*Generator Coordinate Method, GCM*) [24].

Actualmente se pueden clasificar tres grandes modelos muy consolidados dentro del marco del SCMF cuya extensión a BMFA está siendo desarrollada. Por un lado están los modelos que usan la interacción de Skyrme y sus múltiples parametrizaciones (Ref. [22] y referencias incluidas), los modelos de campo medio (y más allá) relativistas (*Relativistic Mean Field, RMF*) [25, 26, 27] y por último los modelos basados en la interacción de Gogny [28, 29, 30, 31, 32, 33, 34]. Como ya se anticipó en la introducción, este trabajo de tesis se engloba precisamente dentro del desarrollo de las técnicas BMFA con interacciones efectivas. En particular, se ha implementado por primera vez el Método de la Coordenada Generadora con funciones de onda que tienen restauradas las simetrías del número de partículas y rotacional, todo ello con la interacción de Gogny.

Los capítulos 3 y 4 están dedicados a introducir los aspectos básicos de las teorías de campo medio autoconsistente (y sus extensiones) con interacciones fenomenológicas efectivas, comenzando precisamente con la descripción de estas últimas.

## Referencias

- [1] NuPECC Report *NuPECC Long Range Plan 2004: Perspectives for Nuclear Physics Research in Europe in the Coming Decade and Beyond* (2004)
- [2] W. Glöckle, H. Witala, Th. Cornelius, Nucl. Phys. A 508, 115 (1990)
- [3] W. Glöckle, H. Kamada, Phys. Rev. Lett. 71, 971 (1993)
- [4] J. Lomnitz-Adler, V. R. Pandharipande, R. A. Smith, Nucl. Phys. A 361,399 (1981)
- [5] J. Carlson, Phys. Rev. C 38, 1879 (1988)
- [6] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson, Steven C. Pieper, R. B. Wiringa, Phys. Rev. C 56, 1720 (1997)
- [7] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, R. Schiavilla, Phys. Rev. C 51, 38 (1995)
- [8] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, J. J. de Swart, Phys. Rev. C 49, 2950 (1994)
- [9] R. Machleidt, K. Holinde, C. Elster, Phys. Rep. 149, 1 (1987)
- [10] R. Machleidt, Phys. Rev. C 63, 024001 (2001)
- [11] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. Vinh Mau, J. Côté, P. Pirès, R. de Torreal, Phys. Rev. C 21, 861 (1980)
- [12] U. van Kolck, Phys. Rev. C 49, 2932 (1994)
- [13] E. Epelbaum, H. Kamada, A. Nogga, H. Witala, W. Glöckle, Ulf-G. Meisner, Phys. Rev. Lett. 86, 4787 (2001)
- [14] D. R. Entem, R. Machleidt, Phys. Lett. B 524, 93 (2001)
- [15] D. C. Zheng, B. R. Barret, L. Jacqua, J. P. Vary, Phys. Rev. C 48, 1083 (1993)
- [16] P. Navrátil, W. E. Ormand, Phys. Rev. Lett. 88, 152502 (2002)
- [17] P. Navrátil, W. E. Ormand, Phys. Rev. C 68, 034305 (2003)
- [18] C. Forssén, P. Navrátil, W. E. Ormand, E. Caurier, Phys. Rev. C 71, 044312 (2005)

- [19] A. P. Zuker, Phys. Rev. Lett. 90, 042502 (2003)
- [20] E. Courier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, A. P. Zuker, Rev. Mod. Phys. 77, 427 (2005)
- [21] B. A. Brown, Prog. Part. Nucl. Phys. 47, 517 (2001)
- [22] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)
- [23] A. Poves, ECT\* Conference *Correlations in nuclei: beyond mean-field and shell model*, Trento, (2007) <http://www.ect.it>
- [24] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [25] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Rep. 409, 101 (2005)
- [26] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 73, 034308 (2006)
- [27] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 74, 064309 (2006)
- [28] J. F. Berger, M. Girod, D. Gogny, Com. Phys. Comm. 63, 365 (1991)
- [29] S. Péru, M. Girod, J. F. Berger, Eur. Phys. J. A 9, 35 (2000)
- [30] M. Anguiano, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 696, 467 (2001)
- [31] R. Rodríguez Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Nucl. Phys. 709, 201 (2002)
- [32] R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 65, 024304 (2002)
- [33] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 69, 054319 (2004)
- [34] T. R. Rodríguez, J. L. Egidio, L. M. Robledo, R. Rodríguez-Guzmán, Phys. Rev. C 71, 044313 (2005)

## Capítulo 3

# Interacciones efectivas fenomenológicas en el medio nuclear

Como se ha mencionado en el capítulo anterior, las interacciones nucleón-nucleón desnudas no se pueden aplicar directamente en cálculos de muchos cuerpos debido al comportamiento divergente repulsivo a cortas distancias. Sin embargo, dicho comportamiento se suaviza en el medio nuclear debido a que el espacio de fases accesible en la dispersión de dos nucleones en un núcleo finito está muy restringido, con lo que se pueden deducir interacciones efectivas adecuadas para los cálculos de estructura nuclear.

Existen dos maneras de abordar el problema de encontrar interacciones efectivas. Desde un punto de vista más fundamental se puede renormalizar la interacción desnuda usando las técnicas de matriz  $G$  [1] o los recientemente desarrollados potenciales  $V_{\text{low}k}$  [2, 3, 4]. Estas interacciones regularizadas se pueden implementar en cálculos dentro del modelo de capas estándar o del modelo de capas sin *core* (NCSM) [5] y las limitaciones de su uso son las mismas que las que se han mencionado previamente.

Por otro lado, se puede adoptar una postura más fenomenológica, postulando una forma funcional de la fuerza y ajustando los parámetros libres de los que depende dicho funcional a propiedades globales de unos pocos núcleos finitos y de materia nuclear. De esta forma se pueden estudiar prácticamente todas las regiones de la tabla de núcleos con cálculos sistemáticos del tipo Hartree-Fock(-Bogoliubov) (HF(B)) y, además, se facilita la extensión a métodos más allá de campo medio (BMFA). El resto del capítulo está dedicado a comentar los principales aspectos de las interacciones efectivas fenomenológicas más usadas en cálculos de campo medio autoconsistente (SCMF),

las fuerzas de Skyrme (Sec. 3.1) y de Gogny (Sec. 3.2) no-relativistas y los métodos de campo medio relativistas (Sec. 3.3).

Como se verá a continuación, la energía del sistema que se deduce con los métodos anteriores depende de la densidad nuclear. Esta dependencia es necesaria para que se puedan obtener a la vez buenas predicciones para los radios, energías de ligadura nucleares y espectros de partícula independiente en núcleos finitos, así como la compresibilidad adecuada en materia nuclear. Existen distintas fuentes que dan origen a términos dependientes de la densidad en las interacciones nucleón-nucleón efectivas [6]. Por un lado las aproximaciones de densidad local (LDA) en la matriz  $G$  incluyen correlaciones a dos cuerpos. Órdenes superiores en el desarrollo de la matriz  $G$  pueden incluirse como un término dependiente de la densidad [7]. Además, un término dependiente de la densidad puede simular la parte tensor de la interacción nuclear desnuda que normalmente no está incluida explícitamente en las interacciones fenomenológicas (aunque hay propuestas recientes que la incluyen [8, 9, 10]). Por último, términos a más cuerpos en la interacción pueden producir una fuerza a dos cuerpos dependiente de la densidad [11].

### 3.1. Interacción de Skyrme

La interacción de Skyrme es probablemente la más utilizada en cálculos extensivos de estructura nuclear a baja energía debido a que el coste computacional requerido para evaluar los elementos de matriz es relativamente bajo. Sus aplicaciones son numerosas tanto a nivel de campo medio como con cálculos BMFA. Sirvan como ejemplo las distintas aplicaciones contenidas en la referencia [12], como estudios sistemáticos de masas y radios, deformación cuadrupolar y octupolar, cálculos de barreras de fisión, espectros de excitación a baja energía o resonancias gigantes. En esta sección se comentarán los aspectos más relevantes de la interacción de Skyrme y sus posibles limitaciones.

Como características principales se destacan las siguientes:

- Es una interacción local.
- Es una interacción de muy corto alcance (su dependencia radial viene determinada por funciones  $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ ) dependiente del momento.
- Es una interacción dependiente de la densidad.
- La parte central no tiene fuerzas de apareamiento y éstas tienen que ser incluidas *ad hoc*.

### 3.1. Interacción de Skyrme

---

Originalmente la interacción de Skyrme se propuso como una interacción a tres cuerpos [13, 14, 11]:

$$V = \sum_{i < j} v_{ij}^{(2)} + \sum_{i < j < k} v_{ijk}^{(3)} \quad (3.1)$$

La parte a dos cuerpos  $v^{(2)}$  en la representación de coordenadas se expresa como:

$$\begin{aligned} v_{Sk}(1, 2) = & t_0 (1 + x_0 P_\sigma \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \\ & + \frac{1}{2} t_1 \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \\ & + t_2 \vec{k}' \cdot \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \\ & + i W_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde  $P_\sigma$  es el operador de intercambio de espín,  $\vec{k} = (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i$  y  $\vec{k}' = -(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i$  son operadores actuando a la derecha y a la izquierda respectivamente y  $\vec{\sigma}$  son las matrices de Pauli de espín. Los tres primeros términos de la interacción simulan un rango finito aunque de muy corto alcance [1]. El último término corresponde a la interacción de espín-órbita obtenido también en el límite de rango pequeño.

El término a tres cuerpos  $v^{(3)}$  se asume que sea de rango cero:

$$v_{Sk}(1, 2, 3) = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \quad (3.3)$$

Esta interacción es equivalente en núcleos par-par cerrado de capas a un término a dos cuerpos lineal en la densidad  $\rho(\vec{r})$  [13, 14, 11]. Sin embargo, con este tipo de dependencia aparecen problemas para tener un valor adecuado de la compresibilidad nuclear y se demostró más eficiente un término del tipo:

$$v_{d-d}(1, 2) = \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \quad (3.4)$$

donde  $\alpha$  habitualmente toma un valor entre 1/3 y 1/6 excepto en las parametrizaciones más antiguas de la interacción de Skyrme donde se escoge  $\alpha = 1$ .

A partir de este potencial nucleón-nucleón, mediante la evaluación de su valor esperado entre funciones de onda de Hartree-Fock, se puede extraer lo que se conoce como el funcional de la energía dependiente de la densidad

Parametrización	Referencia básica
SI-VI	Ref. [11, 19]
SkM	Ref. [20]
SkM*	Ref. [21]
SkP	Ref. [22]
SLy1-10	Ref. [23, 24]
SkI1-5	Ref. [25]
BSk1	Ref. [28]
MSk1-7	Ref. [26, 27]

Tabla 3.1: Distintas familias de parametrizaciones de la interacción de Skyrme usadas en la literatura. Tabla adaptada de Ref. [12]

de Skyrme. Dicho funcional de la energía también se puede extraer de manera formal sin hacer uso de ningún potencial subyacente mediante una aproximación de densidad local (LDA) a la matriz de dispersión nuclear [15, 16, 17]. La expresión completa de dicho funcional de energía depende de distintas densidades locales y corrientes con sus respectivas derivadas. Las constantes de acoplamiento están directamente relacionadas con los parámetros del potencial de Skyrme ( $t_0, t_1, t_2, t_3, W_0, x_0, x_3$  en las Ecs. 3.2-3.4) [18]. Dichas constantes de acoplamiento están ajustadas para obtener correctamente las energías de ligadura y radios de núcleos doblemente mágicos. Dentro del ajuste también entran propiedades de materia nuclear así como la separación de espín-órbita de algún nivel del  $^{16}\text{O}$  o  $^{208}\text{Pb}$ . En la tabla 3.1 se hace un resumen de las distintas parametrizaciones que existen en la literatura [12].

Como se ha mencionado previamente, la interacción de Skyrme, junto con la interacción de Coulomb entre los protones, se usa para calcular la parte de Hartree-Fock (o los niveles de partícula independiente) del sistema. Para el canal de apareamiento se usan habitualmente dos tipos de potenciales [29]. El más sencillo es una interacción constante de contacto (apareamiento de volumen) dada por la expresión:

$$v_{pair,1}(1, 2) = G\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.5)$$

La otra prescripción consiste en un apareamiento dependiente de la densidad con lo que se tiene en cuenta la superficie:

$$v_{pair,2}(1, 2) = G\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) [1 - (\rho(\vec{r}_1)/\rho_c)^\gamma] \quad (3.6)$$



donde  $G, \rho_c$  y  $\gamma$  son parámetros de ajuste.

En este punto se tienen que tener en cuenta dos aspectos importantes. El primero es que, debido a que el apareamiento es de rango cero, los elementos de matriz con altos momentos son muy grandes y se produce un comportamiento divergente en dicho canal. Para curar dichas divergencias se tiene que incluir otro parámetro (*cut-off*) que limite el espacio accesible al apareamiento a una ventana de niveles cerca de la energía de Fermi [12, 29]. El segundo punto tiene que ver con que el uso de distintas interacciones para la parte de HF y para el apareamiento produce serios problemas cuando se extienden los métodos a cálculos más allá de campo medio [30]. Estas deficiencias son aplicables también a los modelos de campo medio (y más allá) relativistas (Sec. 3.3).

## 3.2. Interacción de Gogny

La interacción de Gogny fue propuesta en 1973 por Daniel Gogny como una fuerza de rango finito dependiente de la densidad [31]. Desde entonces se ha empleado con éxito tanto en teorías de campo medio como sus extensiones BMFA para describir propiedades a las comentadas en la sección anterior (estudios sistemáticos de masas y radios, deformación cuadrupolar y octupolar, cálculos de barreras de fisión, espectros de excitación a baja energía o resonancias gigantes, etc.). La forma funcional de la interacción a dos cuerpos propuesta por Gogny es la siguiente [32, 33]:

$$\begin{aligned}
 V(1,2) = & \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) \\
 & + i W_{LS} (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \\
 & + t_3 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

donde  $\mu_i, W_i, B_i, H_i, M_i, W_{LS}, t_3, x_0$  son parámetros de ajuste,  $\vec{k} = (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2$  y  $P_\sigma, P_\tau$  son los operadores de intercambio de espín e isospín respectivamente.

Comparando las expresiones Ecs. 3.2-3.4 con la ecuación ec. 3.7 se puede distinguir claramente que los términos de espín-órbita y dependiente de la densidad son los mismos en las interacciones de Skyrme y de Gogny. Además, los términos de muy corto alcance de la fuerza de Skyrme se sustituyen por el término de rango finito compuesto de dos gaussianas propuesto por Brink y Boeker [34], y que contiene todas las combinaciones posibles de intercam-

bio de espín y de isospín que tiene la interacción nuclear desnuda (términos de Wigner, Barlett, Heisenberg y Majorana). Con la introducción de este término se obtiene de manera natural la parte de apareamiento, y además se consigue a partir de la misma interacción con la que se calcula la parte de HF. Esto último será crucial cuando se usen técnicas BMFA. Por otro lado, la forma gaussiana evita la divergencia ultravioleta que aparece en el apareamiento con interacciones de muy corto alcance. De hecho, debido a estas propiedades, la interacción de Gogny se ha usado para calcular el apareamiento en cálculos en los que la parte de HF se calcula con otra fuerza, ya sea Skyrme [35] o relativista [36].

Otra de las características que hace atractivo el uso de la interacción de Gogny es que no se necesitan muchas parametrizaciones ( $D1$ ,  $D1'$  y la más usada,  $D1S$ ) para describir adecuadamente las propiedades globales de los núcleos, en contraste con la multitud de interacciones de Skyrme (tabla 3.1) y relativistas (tabla 3.3). El valor de los parámetros se muestran en la tabla 3.2.

El ajuste de la fuerza se efectuó teniendo en cuenta las siguientes propiedades [33, 37]:

- El término de espín-órbita se ajusta al valor del desdoblamiento de los niveles  $\epsilon_{p_{3/2}} - \epsilon_{p_{1/2}}$  del  $^{16}\text{O}$ .
- Los parámetros de la interacción central que van con los operadores de intercambio se ajustan para obtener las propiedades de saturación correctas en los núcleos  $^{16}\text{O}$  y  $^{90}\text{Zr}$ , la energía de ligadura por nucleón ( $E/A$ ) y el momento de Fermi de saturación ( $k_f$ ) en materia nuclear y el espectro de una partícula del  $^{16}\text{O}$ .
- Para el término dependiente de la densidad se ajusta la diferencia de energía entre los niveles  $\epsilon_{d_{3/2}} - \epsilon_{p_{1/2}}$  del  $^{16}\text{O}$ .
- La energía de simetría se ajusta con la diferencia de energía entre los niveles  $\epsilon_{2s_{1/2}}(\text{neutrón}) - \epsilon_{2s_{1/2}}(\text{protón})$  del  $^{48}\text{Ca}$  y con los valores calculados para materia nuclear.
- Las propiedades de apareamiento se obtienen a partir del estudio sistemático de los isótopos de estaño.
- En la parametrización  $D1S$  además se ajustan los parámetros teniendo en cuenta la barrera de fisión del  $^{240}\text{Pu}$ .

Es importante hacer notar que el ajuste de la fuerza se efectúa con cálculos de campo medio (HFB). Este hecho puede ser una fuente de desacuerdo

### 3.3. Interacciones relativistas

$D1$	$\mu_i$ (f)	$W_i$ (MeV)	$B_i$ (MeV)	$H_i$ (MeV)	$M_i$ (MeV)
$i = 1$	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56
$i = 2$	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81
$\alpha = 1/3, x_0 = 1, W_{LS} = -115 \text{ MeV}, t_3 = 1350 \text{ MeV fm}^6$					
$D1'$	$\mu_i$ (f)	$W_i$ (MeV)	$B_i$ (MeV)	$H_i$ (MeV)	$M_i$ (MeV)
$i = 1$	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56
$i = 2$	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81
$\alpha = 1/3, x_0 = 1, W_{LS} = -130 \text{ MeV}, t_3 = 1350 \text{ MeV fm}^6$					
$D1S$	$\mu_i$ (f)	$W_i$ (MeV)	$B_i$ (MeV)	$H_i$ (MeV)	$M_i$ (MeV)
$i = 1$	0.7	-1720.30	-1300	-1813.53	1397.90
$i = 2$	1.2	103.64	-163.48	162.81	-223.93
$\alpha = 1/3, x_0 = 1, W_{LS} = -130 \text{ MeV}, t_3 = 1390.60 \text{ MeV fm}^6$					

Tabla 3.2: Valores de los parámetros para las distintas parametrizaciones de la interacción de Gogny usadas en la literatura.

entre teoría y experimento cuando se usen técnicas más allá de campo medio.

Recientemente se ha propuesto una nueva interacción basada en la fuerza de Gogny donde el término dependiente de la densidad se hace de rango finito [38]. Sin embargo, las aplicaciones en cálculos de estructura nuclear son todavía escasas con este nuevo funcional.

### 3.3. Interacciones relativistas

Para completar los métodos que se usan actualmente para estudiar la estructura nuclear de manera sistemática con interacciones fenomenológicas efectivas se debe mencionar el método de campo medio relativista (RMF) [39, 40]. En este caso, a diferencia de las interacciones que se han presentado previamente, donde la dinámica viene descrita por la ecuación de Schrödinger no relativista, se tiene una densidad lagrangiana efectiva de donde se deducen las ecuaciones de movimiento aplicando las expresiones correspondientes de teoría cuántica de campos.

Se pueden distinguir dos grandes tipos de lagrangianos efectivos, aquellos en los que la interacción entre los nucleones viene mediada por el intercambio de mesones ( $\sigma$ ,  $\omega$  y  $\rho$ ) y los que usan interacciones de contacto entre los nucleones. Dichas densidades lagrangianas se construyen con los campos nucleónicos, mesónicos y sus derivadas imponiendo que cumplan las simetrías de

QCD como invariancia Lorentz, invariancia bajo paridad, invariancia gauge electromagnética, simetría de isospín y simetría quiral. En este caso son las constantes de acoplamiento las que se ajustan como parámetros libres a los datos experimentales de núcleos finitos así como a las propiedades de materia nuclear. Debido a que el número de lagrangianos que son compatibles con las simetrías de QCD es infinito se tienen en cuenta sólo los primeros términos en las interacciones a  $N$  cuerpos. Sin embargo, aún teniendo esta restricción, el número de parámetros que se deben ajustar es mayor que los datos experimentales, con lo que se produce una fuerte dependencia de algunos parámetros respecto a otros en los ajustes de las constantes de acoplamiento. Esta indeterminación se solventa mediante argumentos de *naturalidad*, es decir, las interacciones a dos cuerpos tienen que ser más intensas que las de tres cuerpos y así sucesivamente.

Como ejemplo de lagrangiano con intercambio de mesones se tiene el siguiente [40]:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_m + \mathcal{L}_{\text{int}} \quad (3.8)$$

donde  $\mathcal{L}_N$  es el lagrangiano libre de los nucleones de masa desnuda  $m$  representados por los campos fermiónicos  $\psi$  (espinores de Dirac):

$$\mathcal{L}_N = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi \quad (3.9)$$

$\mathcal{L}_m$  es el lagrangiano libre de los mesones  $\sigma$ ,  $\omega$  y  $\rho$  (de masas  $m_\sigma$ ,  $m_\omega$  y  $m_\rho$  respectivamente) y del campo electromagnético  $F_{\mu\nu}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_m &= \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu \\ &+ -\frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \vec{\rho}^\mu \\ &+ -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Además se han definido los siguientes tensores bajo transformaciones de Lorentz:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mu\nu} &= \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu \\ \vec{R}_{\mu\nu} &= \partial_\mu \vec{\rho}_\nu - \partial_\nu \vec{\rho}_\mu \end{aligned} \quad (3.11)$$

### 3.3. Interacciones relativistas

Por último, el término de interacción  $\mathcal{L}_{\text{int}}$  tiene la siguiente forma:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -\bar{\psi}\Gamma_{\sigma}\sigma\psi - \bar{\psi}\Gamma_{\omega}^{\mu}\omega_{\mu}\psi - \bar{\psi}\vec{\Gamma}_{\rho}^{\mu}\vec{\rho}_{\mu}\psi - \bar{\psi}\Gamma_e^{\mu}A_{\mu}\psi \quad (3.12)$$

donde se tienen los siguientes propagadores:

$$\Gamma_{\sigma} = g_{\sigma}; \quad \Gamma_{\omega}^{\mu} = g_{\omega}\gamma^{\mu}; \quad \vec{\Gamma}_{\rho}^{\mu} = g_{\rho}\vec{\tau}\gamma^{\mu}; \quad \Gamma_e^{\mu} = e\frac{1-\tau_3}{2}\gamma^{\mu} \quad (3.13)$$

$g_{\sigma}, g_{\omega}, g_{\rho}$  son las constantes de acoplamiento,  $\tau_3$  la tercera componente de isospín ( $\tau_3 = 1$  para neutrones,  $\tau_3 = -1$  para protones) y  $\gamma^{\mu}$  las matrices de Dirac.

Dentro de los lagrangianos con intercambio de mesones se distinguen a su vez dos tipos, aquellos en los que se incluyen además términos no lineales en los campos mesónicos, y los lineales con constantes de acoplamiento dependientes de la densidad. Estas dependencias se introducen para obtener las propiedades de saturación en materia nuclear adecuadas. En el segundo de los casos las constantes de acoplamiento  $g_{\sigma}, g_{\omega}, g_{\rho}$  dependen de la densidad vector nucleónica definida como:

$$\rho_v = \sqrt{j^{\mu}j_{\mu}}; \quad \text{con } j_{\mu} = \bar{\psi}\gamma_{\mu}\psi \quad (3.14)$$

En el caso en el que se tengan términos no lineales en los campos mesónicos es habitual introducir un término  $-U(\sigma, \omega)$  (o simplificado sólo a los términos en  $\sigma$ ) en la densidad lagrangiana del tipo:

$$U(\sigma, \omega) = \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4 + g_4\sigma\omega_{\mu}\omega^{\mu} - \frac{1}{4}g_5\sigma^2\omega_{\mu}\omega^{\mu} - \frac{1}{4}g_6(\omega_{\mu}\omega^{\mu})^2 \quad (3.15)$$

Como ejemplo de densidad lagrangiana con interacciones de contacto entre los nucleones tenemos [49]:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{libre}} + \mathcal{L}_{4f} + \mathcal{L}_{\text{os}} + \mathcal{L}_{\text{der}} + \mathcal{L}_{\text{em}} \quad (3.16)$$

donde se tienen los siguientes términos (libre, acoplamiento de cuatro fermiones, términos de orden superior, términos de las derivadas y término electromagnético):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{libre}} &= \bar{\psi}(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi \\ \mathcal{L}_{4f} &= -\frac{1}{2}\alpha_S(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\bar{\psi}\gamma_{\mu}\psi)(\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{2} \alpha_{TS} (\bar{\psi} \vec{\tau} \psi) \cdot (\bar{\psi} \vec{\tau} \psi) - \frac{1}{2} \alpha_{TV} (\bar{\psi} \vec{\tau} \gamma_\mu \psi) \cdot (\bar{\psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \psi) \\
 \mathcal{L}_{\text{os}} &= -\frac{1}{3} \beta_S (\bar{\psi} \psi) (\bar{\psi} \psi)^3 - \frac{1}{4} \gamma_S (\bar{\psi} \psi) (\bar{\psi} \psi)^4 - \frac{1}{4} \gamma_V [(\bar{\psi} \gamma_\mu \psi) (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi)]^2 \\
 \mathcal{L}_{\text{der}} &= -\frac{1}{2} \delta_S (\partial_\nu \bar{\psi} \psi) (\partial^\nu \bar{\psi} \psi) - \frac{1}{2} \delta_V (\partial_\nu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi) (\partial^\nu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi) \\
 & - \frac{1}{2} \delta_{TS} (\partial_\nu \bar{\psi} \vec{\tau} \psi) \cdot (\partial^\nu \bar{\psi} \vec{\tau} \psi) - \frac{1}{2} \delta_{TV} (\partial_\nu \bar{\psi} \vec{\tau} \gamma_\mu \psi) \cdot (\partial^\nu \bar{\psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \psi) \\
 \mathcal{L}_{\text{em}} &= -e A_\mu \bar{\psi} [(1 - \tau_3)/2] \gamma^\mu \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

donde  $\alpha_S$ ,  $\alpha_V$ ,  $\alpha_{TS}$ ,  $\alpha_{TV}$ ,  $\beta_S$ ,  $\gamma_S$ ,  $\gamma_V$ ,  $\delta_S$ ,  $\delta_V$ ,  $\delta_{TS}$  y  $\delta_{TV}$  son las constantes de acoplamiento.

Una vez que se tiene la forma funcional de la densidad lagrangiana (ec. 3.8 ó ec. 3.16) se ajustan los valores de las constantes de acoplamiento usando propiedades globales de núcleos finitos y materia nuclear como en el caso de las interacciones no-relativistas. Para ello se resuelven las ecuaciones de movimiento asociadas en la aproximación de campo medio (sin término de intercambio o de Fock). En la tabla 3.3 se representan los lagrangianos relativistas más usados en cálculos de estructura nuclear.

Parametrización	Tipo de lagrangiano	Referencia básica
NL-1	IM+TNL	Ref. [41]
NL-Z	IM+TNL	Ref. [42]
NL-SH	IM+TNL	Ref. [43]
TM1-2	IM+TNL	Ref. [44]
NL-3	IM+TNL	Ref. [45]
NL-SV1-2	IM+TNL	Ref. [46]
DDRH	IM+ADD	Ref. [47]
DDME-1	IM+ADD	Ref. [48]
NHM	IC	Ref. [49]
FZ, VZ, FA, VA	IC	Ref. [50]
PC-F1-4	IC	Ref. [51]

Tabla 3.3: Distintas densidades lagrangianas y respectivas parametrizaciones usadas en los modelos RMF. IM+TNL=intercambio de mesones con términos no lineales; IM+ADD=intercambio de mesones con acoplamientos dependientes de la densidad; IC=interacción de contacto

### 3.3. Interacciones relativistas

---

Es importante mencionar que, al igual que ocurre con las interacciones de Skyrme, se usan interacciones diferentes a las dadas en las ecuaciones 3.8-ec. 3.16 para calcular el apareamiento, como funciones tipo  $\delta$  o términos basados en la interacción de Gogny. De nuevo esto puede causar problemas cuando se extienden los cálculos a técnicas BMFA y, en el caso de las interacciones de rango cero, aparecen de nuevo las divergencias ultravioletas, con lo que se tiene que elegir una ventana alrededor del nivel de Fermi que especifique los niveles activos para el apareamiento.

Para un resumen de las aplicaciones de los modelos de campo medio relativistas actuales se puede consultar la referencia [40].

## Referencias

- [1] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [2] S. Bogner, T. T. S. Kuo, L. Coraggio, Nucl. Phys. A 684, 432c (2001)
- [3] S. Bogner, T. T. S. Kuo, L. Coraggio, A. Covello, N. Itaco, Phys. Rev. C 65, 051301(R) (2002)
- [4] S. K. Bogner, T. T. S. Kuo, A. Schwenk, Phys. Rep. 386, 1 (2003)
- [5] L. Coraggio, A. Covello, A. Gargano, N. Itaco, T. T. S. Kuo, Phys. Rev. C 75, 057303 (2007)
- [6] T. Duguet, P. Bonche, Phys. Rev. C 67, 054308 (2003)
- [7] H. A. Bethe, Annu. Rev. Nucl. Sci. 21, 93 (1971)
- [8] T. Otsuka, T. Matsuo, D. Abe, Phys. Rev. Lett. 97, 162501 (2006)
- [9] W.-H. Long, N. Van Giai, J. Meng, Phys. Lett. B 640, 150 (2006)
- [10] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, J. Meyer, arxiv:0704.0731
- [11] D. Vautherin, D. M. Brink, Phys. Rev. C 5, 626 (1972)
- [12] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)
- [13] T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. 1, 1043 (1956)
- [14] J.S. Bell, T. H. R. Skyrme, Phil. Mag. 1, 1055 (1956)
- [15] J. W. Negele, D. Vautherin, Phys. Rev C 5, 1472 (1972)
- [16] J. W. Negele, D. Vautherin, Phys. Rev C 11, 1031 (1975)
- [17] X. CAmpli, A. Bouyssy, Phys. Lett. B 73, 263 (1978)
- [18] J. Dobaczewski, J. Dudek, Phys. Rev C 52, 1827 (1995)
- [19] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, P. Quentin, Nucl. Phys. A 238, 29 (1975)
- [20] H. Krivine, J. Treiner, O. Bohigas, Nucl. Phys. A 336, 155 (1980)



## Referencias

---

- [21] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, H.-B. Håkanson, Nucl. Phys. A 386, 79 (1982)
- [22] J. Dobaczewski, H. Flocard, J. Treiner, Nucl. Phys. A 422, 103 (1984)
- [23] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. A 635, 231 (1998)
- [24] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. A 643, 441 (1998)
- [25] P. -G. Reinhard, H. Flocard, Nucl. Phys. A 584, 467 (1995)
- [26] F. Tondeur, S. Goriely, J. M. Pearson, M. Onsi, Phys. Rev. C 62, 024308 (2000)
- [27] S. Goriely, F. Tondeur, J. M. Pearson, At. Data Nucl. Data Tables 77, 311 (2001)
- [28] M. Samyn, S. Goriely, P.-H. Heenen, J. M. Pearson, F. Tondeur, Nucl. Phys. A 700, 142 (2002)
- [29] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T. R. Werner, J. F. Berger, C. R. Chinn, J. Dechargé, Phys. Rev. C 53, 2809 (1996)
- [30] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 696, 467 (2001)
- [31] D. Gogny, Proceedings of the Intern. Conf. on Nuclear Physics (Munich, 1973)
- [32] D. Gogny, Nucl. Phys. A 237, 399 (1975)
- [33] J. Dechargé, D. Gogny, Phys. Rev. C 21, 1568 (1980)
- [34] D. M. Brink, E. Boeker, Nucl. Phys. 91, 1 (1967)
- [35] M. Grasso, N. Van Giai, N. Sandulescu, Phys. Lett. B 535, 103 (2002)
- [36] T. Gonzalez-Llarena, J.L. Egido, G.A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Lett. B 379, 13 (1996)
- [37] J. F. Berger, M. Girod, D. Gogny, Com. Phys. Comm. 63, 365 (1991)
- [38] M. Farine, D. Von-Eiff, P. Schuck, J. F. Berger, J. Dechargé, M. Girod, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 25, 863 (1999)
- [39] B. D. Serot, J. D. Walecka, Adv. Nucl. Phys. 16, 1 (1986)

- [40] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Rep. 409, 101 (2005)
- [41] P.-G. Reinhard, M. Rufa, J. Maruhn, W. Greiner and J. Friedrich, Z. Phys. A 323, 13 (1986)
- [42] M. Rufa, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, W. Greiner, M. R. Strayer, Phys. Rev. C 38, 390 (1988)
- [43] M. M. Sharma, M. A. Nagarajan, P. Ring, Phys. Lett. B 312, 377 (1993)
- [44] Y. Sugahara, H. Toki, Nucl. Phys. A 579, 557 (94)
- [45] G. A. Lalazissis, J. König, P. Ring, Phys. Rev. C 55, 540 (1997)
- [46] M. M. Sharma, A. R. Farhan, and S. Mythili, Phys. Rev. C 61, 054306 (2000)
- [47] S. Typel, H. H. Wolter, Nucl. Phys. A 656, 331 (1999)
- [48] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Finelli, P. Ring, Phys. Rev. C 66, 024306 (2002)
- [49] B. A. Nikolaus, T. Hoch, D. G. Madland Phys. Rev. C 46, 1757 (1992)
- [50] John J. Rusnak, R. J. Furnstahl, Nucl. Phys. A 627, 495 (1997)
- [51] T. Bürvenich, D. G. Madland, J. A. Maruhn, P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C 65, 044308 (2002)

## Capítulo 4

# Método de Hartree-Fock-Bogoliubov y sus extensiones

En este capítulo se estudiará el método de campo medio autoconsistente más general posible, el método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) (Sec. 4.1). Además, se describirán de manera general los métodos más allá de campo medio (BMFA) que se usan en este trabajo (Sec. 4.2), el método de la coordenada generadora GCM (Sec. 4.2.1) y la restauración de las simetrías (Sec. 4.2.2).

### 4.1. El método de Hartree-Fock-Bogoliubov

Como se ha comentado en el capítulo 2, la resolución del problema de muchos cuerpos nuclear conduce inevitablemente a aproximaciones y modelos que restrinjan el espacio de Hilbert asociado. En esta sección se estudiará el método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) en el que se basan las técnicas desarrolladas y los resultados obtenidos en este trabajo. Dicho método está fundamentado en el Principio Variacional. En este caso se postula un conjunto de funciones de onda prueba y la mejor aproximación a la solución exacta del problema es aquella que minimiza la energía del sistema. El teorema de Ritz garantiza además que se obtendrá la solución exacta si ésta está incluida dentro del espacio variacional de prueba. En caso contrario se obtendrá una energía mayor que la energía del estado fundamental. Los estados excitados además se construyen imponiendo condiciones de ortogonalidad.

En un sistema de fermiones como el núcleo atómico, el espacio de funciones de onda prueba más sencillo corresponde al conjunto de productos antisimetrizados de funciones de onda de una sola partícula (determinantes de Slater). El método variacional aplicado a este tipo de funciones de onda conduce a las ecuaciones de Hartree-Fock (HF) cuya solución define las energías de partícula independiente de un sistema de fermiones que no interactúan entre sí y que se mueven en un potencial promedio externo [1]. En esta aproximación no se incluye ninguna correlación entre los nucleones salvo el principio de Pauli contenido en la antisimetrización del producto.

Los determinantes de Slater se pueden generalizar al producto antisimetrizado de funciones de onda de una sola *cuasipartícula* para incluir más correlaciones en la función de onda, en particular el apareamiento responsable de la superconductividad y superfluidez. Con estas funciones de onda prueba y aplicando el método variacional se deducen las ecuaciones de HFB que hallaremos a continuación [1].

En primer lugar, se define el hamiltoniano no relativista más general que incluye interacciones a dos cuerpos:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} \quad (4.1)$$

donde el elemento de matriz antisimetrizado  $\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4}$  se define como:

$$\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3} \quad (4.2)$$

Los operadores de creación y destrucción de fermiones ( $c_i^\dagger, c_i$ ) corresponden a una base arbitraria del espacio de Hilbert de una sola partícula donde ( $i$ ) es un conjunto dado de números cuánticos (por ejemplo,  $(nljm_j)$  en un oscilador armónico esférico). El método de HFB consiste en encontrar unos operadores de una sola partícula fermiónicos ( $\beta_k^\dagger, \beta_k$ ) definidos por la transformación lineal más general posible entre los operadores ( $c_i^\dagger, c_i$ ) o transformación de HFB, de manera que el hamiltoniano (ec. 4.1) se escriba en términos de esos operadores como:

$$\hat{H} = E_{\text{HFB}} + \sum_k E_k \beta_k^\dagger \beta_k + \hat{V}_{\text{res}} \quad (4.3)$$

donde [2, 1]:

$$\beta_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \quad (4.4)$$

#### 4.1. El método de Hartree-Fock-Bogoliubov

---

Los operadores definidos en la ecuación anterior se denominan operadores de cuasipartícula. Los coeficientes  $(U, V)$  son los parámetros variacionales que, debido a que las reglas de anticonmutación para  $(c_i^\dagger, c_i)$  y  $(\beta_k^\dagger, \beta_k)$  tienen que ser las mismas, no son completamente arbitrarios sino que cumplen las siguientes relaciones de unitariedad:

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}; \quad \mathcal{W}^\dagger \mathcal{W} = 1; \quad \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger = 1 \quad (4.5)$$

Además, dichos coeficientes se hallan de tal manera que la interacción residual  $\hat{V}_{\text{res}}$  sea mínima. Para ello se minimiza el funcional:

$$E' [|\Phi\rangle] = \frac{\langle \Phi | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (4.6)$$

donde las funciones  $|\Phi\rangle$  son vacío de cuasipartículas, y  $\lambda_N, \lambda_Z$  son multiplicadores de Lagrange cumpliéndose las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \beta_k |\Phi\rangle &= 0 \quad \forall k \\ \lambda_N \Rightarrow \langle \Phi | \hat{N} | \Phi \rangle &= N \\ \lambda_Z \Rightarrow \langle \Phi | \hat{Z} | \Phi \rangle &= Z \end{aligned} \quad (4.7)$$

El carácter de producto de estas funciones de onda se ve claramente si se expresa  $|\Phi\rangle$  como:

$$|\Phi\rangle = \prod_q \beta_q |-\rangle \rightarrow \beta_k |\Phi\rangle = \prod_q \beta_k \beta_q |-\rangle = 0 \quad (4.8)$$

donde  $|-\rangle$  es el vacío desnudo y se han utilizado las relaciones de anticonmutación de los operadores fermiónicos.

Además, es importante reseñar que la transformación de HFB (ec. 4.4) viola en general todas las simetrías del hamiltoniano. Con ello se consigue aumentar el espacio variacional manteniendo la estructura sencilla de producto. En particular, hace que la función de onda  $|\Phi\rangle$  no conserve el número de partículas. Por tanto, se impone como condición subsidiaria que se obtenga el número de partículas en promedio (ec. 4.7). Este procedimiento se puede extender además no sólo a los operadores del número de partículas sino a cualquier operador  $\hat{Q}_i$  que sea de interés físico como deformaciones multipolares, fluctuaciones cuánticas, etcétera. Para ello basta simplemente con introducir tantos multiplicadores de Lagrange como operadores en la

expresión (ec. 4.6), obteniéndose:

$$E' [|\Phi(\vec{q})\rangle] = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \hat{\vec{Q}} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle}$$

$$\lambda_{\vec{q}} \Rightarrow \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\vec{Q}} | \Phi(\vec{q}) \rangle = \vec{q} \quad (4.9)$$

Este es el denominado método de HFB con ligaduras o HFB constreñido (*Constrained HFB*).

Antes de aplicar el principio variacional para obtener las ecuaciones de HFB se deben definir dos ingredientes básicos que son la matriz densidad  $\rho_{ll'}$  y el tensor de apareamiento  $\kappa_{ll'}$ :

$$\begin{aligned} \rho_{ll'} &= \langle \Phi | c_{l'}^\dagger c_l | \Phi \rangle = (V^* V^T)_{ll'} \\ \kappa_{ll'} &= \langle \Phi | c_{l'} c_l | \Phi \rangle = (V^* U^T)_{ll'} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Aplicando el teorema de Wick [1] se demuestra que el valor esperado de cualquier operador evaluado entre las funciones  $|\Phi\rangle$  se puede expresar en términos de la matriz densidad y del tensor de apareamiento solamente. En particular, la energía de HFB (véase la expresión ec. 4.3) será:

$$E_{\text{HFB}} = \text{Tr} \left( t\rho + \frac{1}{2}\Gamma\rho - \frac{1}{2}\Delta\kappa^* \right) \quad (4.11)$$

donde se han definido los campos de HF ( $\Gamma$ ) y de apareamiento ( $\Delta$ ) como:

$$\Gamma_{ll'} = \sum_{qq'} \bar{v}_{lql'q'} \rho_{q'q} \quad (4.12)$$

$$\Delta_{ll'} = \sum_{qq'} \bar{v}_{ll'qq'} \kappa_{qq'} \quad (4.13)$$

A continuación se aplica el método variacional al funcional (ec. 4.6). Debido a que las matrices ( $U, V$ ) cumplen las relaciones de unitariedad (ec. 4.5) resulta más adecuado parametrizar el espacio variacional en términos de la matriz antisimétrica  $\mathbb{Z}$  determinada unívocamente por el estado  $|\Phi(\mathbb{Z})\rangle$ . Dicha parametrización está basada en el teorema de Thouless [3] que relaciona dos funciones de onda de tipo producto no ortogonales entre sí de la siguiente

manera:

$$|\Phi(\mathbb{Z})\rangle = \langle \Phi | \Phi(\mathbb{Z}) \rangle \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{ll'} \mathbb{Z}_{ll'} \beta_l^\dagger \beta_{l'}^\dagger \right] |\Phi\rangle \quad (4.14)$$

A partir de esta expresión se obtiene:

$$\begin{aligned} \delta E' [|\Phi(\vec{q})\rangle]_{|\Phi(\vec{q})\rangle=|\text{HFB}(\vec{q})\rangle} &= 0 \iff \\ \left( \frac{\partial E'(\mathbb{Z})}{\partial \mathbb{Z}} \right)_{\mathbb{Z}=0} \delta \mathbb{Z} &= 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

Se puede demostrar [1] que de la variación mostrada en la ecuación (ec. 4.15) se deducen las ecuaciones de HFB:

$$\mathcal{H}^{20} - \lambda_N \mathcal{N}^{20} - \lambda_Z \mathcal{Z}^{20} - \sum_i \lambda_{q_i} \mathcal{Q}_i^{20} = 0 \quad (4.16)$$

Además, para determinar la tercera transformación del teorema de Bloch-Messiah [1] es habitual imponer la condición:

$$\mathcal{H}^{11} = \text{diagonal} \quad (4.17)$$

donde se han definido las siguientes matrices:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{20} &= U^\dagger (t + \Gamma + \delta\Gamma) V^* - V^\dagger (t + \Gamma + \delta\Gamma)^T U^* \\ &+ U^\dagger \Delta U^* - V^\dagger \Delta^* V^* \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{11} &= U^\dagger (t + \Gamma + \delta\Gamma) U - V^\dagger (t + \Gamma + \delta\Gamma)^T V \\ &+ U^\dagger \Delta V - V^\dagger \Delta^* U \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{kk'}^{20} &= \langle \Phi | [\beta_{k'} \beta_k, \hat{O}] | \Phi \rangle \\ \hat{O} &= \{\hat{N}, \hat{Z}, \hat{Q}_i\} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Por otra parte, debido a que el hamiltoniano depende explícitamente de la densidad, aparecen en las ecuaciones (ec. 4.18-4.19) los campos  $\delta\Gamma$  que son los denominados términos de reacomplamiento (*rearrangement terms*).

Otra manera habitual de expresar las ecuaciones de HFB es la forma

matricial [1]:

$$\begin{pmatrix} h' & \Delta \\ -\Delta^* & -h'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

donde  $E_k$  son las energías de cuasipartícula (véase ec. 4.3) y el campo  $h' = t + \Gamma + \delta\Gamma - \lambda_N - \lambda_Z - \sum_i \lambda_{q_i}$ .

Las ecuaciones anteriores son no-lineales y se resuelven autoconsistentemente con métodos de diagonalizaciones sucesivas (ec. 4.21) o mediante el método del gradiente (ec. 4.17). Este último es particularmente adecuado cuando se usan muchas ligaduras y es el que se emplea en este trabajo [4].

Finalmente se obtienen como solución al problema variacional con ligaduras (ec. 4.15) las funciones de onda  $|\text{HFB}(\vec{q})\rangle$  con las que se pueden hallar valores esperados de operadores de interés físico. En particular, se pueden definir superficies de energía potencial (*Potential Energy Surfaces, PES*) a nivel de campo medio dando valores a las ligaduras  $\{\vec{q}\}$ :

$$E_{\text{HFB}}(\vec{q}) = \frac{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | \hat{H} | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle} \quad (4.22)$$

## 4.2. Métodos más allá de campo medio

En la sección anterior se vio que el método de HFB, así como cualquier método de campo medio, se basa en emplear un espacio variacional de funciones de onda de muchos cuerpos sencillas (tipo producto). Sin embargo, la descripción del sistema con una única función de onda tipo producto es incapaz de incluir importantes correlaciones. Por ejemplo, para que la energía resultante a nivel de campo medio se aproxime a la energía exacta del estado fundamental se tienen que usar funciones de onda que no son autoestados de los operadores asociados a las simetrías del hamiltoniano. No obstante, la solución exacta sí debe tener los correspondientes números cuánticos asociados a dichas simetrías. Por otro lado, en la aproximación de campo medio tampoco se incluye el movimiento colectivo a lo largo de los grados de libertad más relevantes del sistema.

Para tener en cuenta todas estas correlaciones y mejorar la calidad de la función de onda que describe el sistema se proponen diferentes métodos que van más allá de la aproximación HFB. En particular, en este trabajo se va a utilizar el método de la coordenada generadora o generatriz (GCM) y unos casos especiales del GCM que son los métodos de restauración de las simetrías. En las siguientes secciones se describirán brevemente los conceptos generales de dichos métodos mientras que en capítulos sucesivos se



profundizará en los detalles de las diferentes técnicas.

### 4.2.1. Método de la coordenada generadora

El método de la coordenada generadora o generatriz (*Generator Coordinate Method*, GCM) se basa en el concepto de mezcla de configuraciones [1]. Es un método general en el que se propone como función de onda del sistema la siguiente combinación lineal:

$$|\Psi\rangle = \int f(\vec{q})|\psi(\vec{q})\rangle d\vec{q} \quad (4.23)$$

donde  $\{|\psi(\vec{q})\rangle\}$  es un conjunto (en general no-ortonormal) de funciones de onda de muchos cuerpos que dependen paramétricamente de las variables colectivas  $\vec{q}$ . Los pesos  $f(\vec{q})$  se determinan variacionalmente minimizando el funcional:

$$E[|\Psi\rangle] = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (4.24)$$

De aquí se deduce una ecuación de autovalores generalizada conocida como ecuación de Hill-Wheeler-Griffin (HWG) [5, 6]:

$$\int \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{q}') f^\sigma(\vec{q}') d\vec{q}' = E^\sigma \int \mathcal{N}(\vec{q}, \vec{q}') f^\sigma(\vec{q}') d\vec{q}' \quad (4.25)$$

donde  $E^\sigma$  son las energías y además se han definido los solapes del hamiltoniano y de la norma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{q}') &= \langle\psi(\vec{q})|\hat{H}|\psi(\vec{q}')\rangle \\ \mathcal{N}(\vec{q}, \vec{q}') &= \langle\psi(\vec{q})|\psi(\vec{q}')\rangle \end{aligned} \quad (4.26)$$

La manera habitual de resolver la ecuación de HWG consiste en hallar una base ortogonal a partir de los estados  $\{|\psi(\vec{q})\rangle\}$ . Para ello se diagonaliza en primer lugar la matriz de la norma:

$$\int \mathcal{N}(\vec{q}, \vec{q}') u_k(\vec{q}') = n_k u_k(\vec{q}) \quad (4.27)$$

A partir de los autovalores  $n_k \neq 0$  y sus autovectores correspondientes  $u_k(\vec{q})$  se construyen los estados de la llamada base natural:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \int u_k(\vec{q}) |\psi(\vec{q})\rangle d\vec{q} \quad (4.28)$$

donde ahora estos estados son ortonormales por construcción y se puede desarrollar la función de onda original (ec. 4.23) en dicha base:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k, n_k \neq 0} g_k |k\rangle \quad (4.29)$$

Con estas expresiones, la ecuación de HWG (ec. 4.25) se transforma en una ecuación de autovalores:

$$\sum_{kk'} \langle k | \hat{H} | k' \rangle g_{k'}^\sigma = E^\sigma |k\rangle \quad (4.30)$$

Resolviendo la ecuación anterior se encuentran las energías y los pesos que determinan los estados  $|\Psi^\sigma\rangle$ . Con esta información se puede hallar además el valor esperado de cualquier operador dentro de este formalismo. Por último, aunque el módulo al cuadrado de las funciones  $f^\sigma(\vec{q})$  no tiene el significado de densidad de probabilidad de encontrar el sistema en la posición generalizada  $\vec{q}$ , se pueden definir las llamadas funciones de onda colectivas  $G^\sigma(\vec{q})$  de manera que sí tengan tal sentido:

$$G^\sigma(\vec{q}) = \sum_k g_k^\sigma u_k(\vec{q}) \quad (4.31)$$

### 4.2.2. Restauración de las simetrías

En el método de HFB para que la energía calculada se aproxime a la energía exacta del estado fundamental se tienen que usar funciones de onda que no son autoestados de los operadores asociados a simetrías  $\hat{S}$ , donde <sup>1</sup>:

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (4.32)$$

---

<sup>1</sup>Para una discusión detallada de la restauración de las simetrías para el término dependiente de la densidad véase la referencia [16] y las secciones (6.1.3-5.1.3)

En el caso que tengamos una función de onda  $|\Phi\rangle$  del tipo HFB, en general se cumple que:

$$\hat{S}|\Phi\rangle \neq c_s|\Phi\rangle \quad (4.33)$$

Sin embargo, las funciones de onda exactas sí que deben ser autoestados simultáneamente del hamiltoniano y de los operadores asociados a las simetrías. Por tanto, para obtener una descripción mejor del núcleo así como para obtener valores de observables en el sistema de laboratorio se hace necesario restaurar las simetrías rotas a nivel de campo medio. La manera más habitual consiste en aplicar el mecanismo de proyección [1] en el que las funciones de onda de campo medio se proyectan sobre el subespacio de autofunciones de  $\hat{S}$  mediante la aplicación del proyector  $P^S$ :

$$|\Phi\rangle \longrightarrow P^S|\Phi\rangle = |\Psi^S\rangle \quad (4.34)$$

De esta manera,  $|\Psi^S\rangle$  cumple la ecuación de autovalores de  $\hat{S}$ :

$$\hat{S}|\Psi^S\rangle = c_s|\Psi^S\rangle \quad (4.35)$$

Además, la función de onda definida en la ecuación (ec. 4.34) deja de ser de tipo producto y se puede ver como una función GCM (véase ec. 4.23):

$$|\Psi^S\rangle = \int f(v)|\Phi(v)\rangle dv = \int f(v)M(v)|\Phi\rangle dv \quad (4.36)$$

donde las funciones  $|\Phi(v)\rangle$  se generan mediante la aplicación de los elementos del grupo de simetría  $M(v)$  sobre la función de onda de campo medio  $|\Phi\rangle$ . Los pesos  $f(v)$  que minimizan la energía y a la vez consiguen que  $|\Phi(v)\rangle$  cumpla la ecuación (ec. 4.35) están determinados por la simetría correspondiente [7]. Un ejemplo de proyección es la restauración del número de partículas, donde la simetría asociada es  $U(1)$ , el parámetro  $v = \varphi$ ,  $M(v) = e^{i\varphi\hat{N}}$  y los pesos  $f(v) = e^{-i\varphi N}/(2\pi)$ , quedando la función de onda finalmente:

$$|\Psi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)}|\Phi\rangle d\varphi \quad (4.37)$$

Desde el punto de vista variacional se distinguen dos tipos de proyecciones, la proyección después de la variación (*Projection after variation*, PAV) y la variación después de la proyección (*Variation after projection*, VAP). En el PAV se utilizan funciones de onda de tipo producto que son solución de las ecuaciones de HFB (o equivalentes) que posteriormente se proyectan. Con

estas nuevas funciones de onda se hallan los valores esperados de cualquier operador, en particular, de la energía:

$$E_{\text{PAV}}^S(\vec{q}) = \frac{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger \hat{H} P^S | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger P^S | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle} \quad (4.38)$$

Se puede ver inmediatamente que la expresión anterior corresponde a la proyección de la superficie de energía potencial definida en la ecuación (ec. 4.22).

Por otra parte, el VAP consiste en usar las funciones de onda proyectadas  $|\Psi^S\rangle$  como espacio variacional y minimizar la energía proyectada:

$$\begin{aligned} \delta E'^S(\vec{q})|_{P^S|\Phi(\vec{q})=P^S|\text{VAP}(\vec{q})} &= 0 \Rightarrow \\ \delta \left( \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | (P^S)^\dagger \hat{H} P^S | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | P^S | \Phi(\vec{q}) \rangle} - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \cdot \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\vec{Q}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \right)_{|\Phi(\vec{q})=\text{VAP}(\vec{q})} &= 0 \end{aligned} \quad (4.39)$$

De manera análoga a la obtención de las ecuaciones de HFB y su extensión al caso con ligaduras (ec. 4.16), se pueden deducir las ecuaciones de HFB proyectadas [1, 8, 9, 10].

Es evidente que con el método VAP se obtiene una solución mucho más próxima a la exacta que con el HFB y con el PAV ya que se emplea un espacio variacional mucho mayor. No obstante, mientras que estos últimos requieren un coste computacional asequible en cualquier caso, el método VAP es mucho más costoso y en ocasiones, inaplicable. Parte de este trabajo de tesis consiste en el estudio de métodos que aproximan la solución VAP, como el método de Lipkin-Nogami (LN) y su proyección PAV (PLN) en la proyección a buen número de partículas [11, 12, 13], o el método de la variación después de la proyección restringido (*Restricted Variation After Projection, RVAP*), aplicable a cualquier tipo de proyección [14, 15].

Hasta la fecha se han implementado distintas técnicas más allá de campo medio con las interacciones fenomenológicas descritas en el capítulo 3. En este trabajo se ha aplicado por primera vez con la interacción de Gogny el método del generador de coordenadas (utilizando el grado de libertad cuadrupolar como coordenada colectiva) con funciones de onda proyectadas simultáneamente al número de partículas y al momento angular. Además, las funciones de tipo producto intrínsecas se hallan minimizando la energía proyectada a buen número de partículas (VAP). Todo ello supone una mejora sustancial

con respecto a otros trabajos anteriormente realizados con la interacción de Gogny y con respecto a los métodos empleados con la interacción de Skyrme y relativista. En el primer caso, hasta ahora se había estudiado por separado la proyección a buen número de partículas, tanto PAV como VAP [10], y el generador de coordenadas con proyección a buen momento angular [16], pero no se había realizado una proyección simultánea. En los casos de Skyrme [13] y relativista [17, 18] se ha utilizado la proyección simultánea al número de partículas y al momento angular aunque el cálculo autoconsistente se hace a nivel de campo medio o con la prescripción de Lipkin-Nogami, en lugar de utilizar el VAP como en este trabajo.

En los capítulos siguientes (5 y 6) se analizarán las mejoras metodológicas realizadas y se compararán con otras aproximaciones como las descritas en el párrafo anterior.

## Referencias

- [1] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [2] N. N. Bogoliubov, Sov. Phys. JEPT 7, 41 (1958).
- [3] D. J. Thouless, Nucl. Phys. 225, 310 (1960).
- [4] J. L. Egido, J. Lessing, V. Martin, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 594, 70 (1995)
- [5] D. L. Hill, J. A. Wheeler, Phys. Rev. 89, 1102 (1953)
- [6] J. J. Griffin, J. A. Wheeler, Phys. Rev. 108, 311 (1957)
- [7] H. D. Zeh, Z. Phys. 202, 38 (1967)
- [8] J. L. Egido, P. Ring, Nucl. Phys. A383, 189 (1982)
- [9] J. A. Sheikh, P. Ring, Nucl. Phys. A 665, 71 (2000)
- [10] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 696, 467 (2001)
- [11] H.J. Lipkin, Ann. Phys. (N.Y.) 9, 272 (1960)
- [12] Y. Nogami, Phys. Rev. 134, B313 (1964)
- [13] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)
- [14] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, L. M. Robledo, R. Rodríguez-Guzmán, Phys. Rev. C 71, 044313 (2005)
- [15] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, and L. M. Robledo, Phys. Rev. C 72, 064303 (2005)
- [16] R. Rodríguez Guzmán, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. 709, 201 (2002)
- [17] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 73, 034308 (2006)
- [18] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 74, 064309 (2006)

## Capítulo 5

# Estudio de las correlaciones de apareamiento

El apareamiento es una parte esencial en muchas ramas de la física y especialmente en Física Nuclear. En este caso, la parte de corto alcance de la interacción favorece energéticamente la formación de pares de nucleones acoplados a momento angular cero. Existen muchas evidencias experimentales que prueban la existencia de estos pares, entre las que destacan:

- Los estados fundamentales de los núcleos par-par tienen un momento angular total igual a cero.
- Sólo existen cuatro núcleos impar-impar estables.
- En los espectros de núcleos par-par las excitaciones de una sola partícula aparecen por encima de 1-2 MeV con respecto al estado fundamental (*gap de energía*), mientras que en los núcleos impar-par la densidad de niveles excitados es más alta.
- En la parte de baja energía de los espectros de excitación aparecen menos estados de los que en principio permite el acoplo de los momentos angulares de los nucleones de valencia.
- El efecto *par-impar* en las energías de ligadura  $M_{(A \text{ impar})} > (M_{(A-1)} - M_{(A+1)})/2$ .
- Observables como los momentos de inercia de núcleos rotacionales y las energías de excitación de los primeros estados  $2^+$  no se pueden explicar sin la existencia de apareamiento en el sistema.

Desde un punto de vista teórico, el apareamiento en sistemas físicos se ha estudiado tanto en hamiltonianos sencillos como en cálculos realistas con interacciones nucleares.

Los primeros normalmente pertenecen a una clase de hamiltonianos exactamente resolubles y se pueden aplicar al estudio tanto de núcleos atómicos como de otros sistemas cuánticos altamente correlacionados [1]. La solución exacta, dependiendo del sistema, se puede hallar mediante diagonalización directa, con formalismo de cuasi-espín (por ejemplo, en el modelo de *seniority* [2]) o mediante la solución de Richardson [3]. Como se verá más adelante, una de las grandes ventajas que tienen estos modelos es que sirven para comprobar la calidad de las aproximaciones a la solución exacta que se llevan a cabo en problemas realistas. Sin embargo, debido a que el apareamiento no es el único grado de libertad relevante, se tiene que ir más allá de los hamiltonianos de apareamiento para describir adecuadamente los núcleos atómicos.

El modelo de campo medio autoconsistente más sencillo que incluye correlaciones de apareamiento es el modelo BCS (Bardeen, Cooper y Schrieffer) [4]. Originariamente desarrollado para explicar la superconductividad en sistemas de electrones, fue inmediatamente aplicado en Física Nuclear [5, 6]. El método se basa en proponer como funciones de prueba las siguientes:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger) |-\rangle \quad (5.1)$$

donde  $|-\rangle$  el vacío, los operadores  $c_k^\dagger$  son los inversos temporales de los operadores  $c_k$  y  $u_k, v_k$  son los parámetros variacionales que se determinan resolviendo las ecuaciones BCS [2].

Una de las características principales de la función de onda definida anteriormente es que no es autoestado del número de partículas y en las ecuaciones correspondientes se tiene que imponer la condición de que en promedio se tenga el número correcto. Además, la función de onda BCS es vacío para los operadores de cuasipartículas definidos por la transformación de Bogoliubov como:

$$\begin{aligned} \alpha_k^\dagger &= u_k c_k^\dagger - v_k c_{\bar{k}} \\ \alpha_{\bar{k}}^\dagger &= u_k c_{\bar{k}}^\dagger + v_k c_k \\ u_k &= u_{\bar{k}} > 0; \quad v_{\bar{k}} = -v_k < 0; \quad k > 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$



---

Por tanto, el método BCS es un caso particular del método de HFB discutido en el capítulo anterior.

Precisamente el hecho de que las funciones de onda de campo medio (BCS o HFB) no sean autoestados del número de partículas permite, con una estructura de la función de onda relativamente sencilla, la inclusión de parte de las correlaciones de apareamiento entre los nucleones. Además, cuanto mayor sean estas correlaciones, mejor será la aproximación de campo medio. Sin embargo, obviamente también ocurre lo contrario y en el límite de apareamiento pequeño, el método de HFB es incapaz de describir el problema y se tiene que ir más allá de la descripción de campo medio, en este caso, restaurando la simetría del número de partículas.

Aunque la proyección a buen número de partículas se ha venido usando desde hace más de 30 años con interacciones esquemáticas, sólo recientemente se ha podido aplicar en cálculos con interacciones efectivas fenomenológicas como las comentadas en el capítulo 1 [7, 8, 9]. Además, el cálculo totalmente variacional con funciones de onda proyectadas (VAP) hasta el momento sólo se ha realizado con la interacción de Gogny [7, 10, 11] mientras que para interacciones de Skyrme y relativistas se ha venido usando el método de Lipkin-Nogami Proyectado (*PLN, Projected Lipkin-Nogami*) como una aproximación al método VAP.

En este capítulo vamos a estudiar las correlaciones de apareamiento dependiendo de la aproximación que se use para la función de onda del problema de muchos cuerpos. Estas aproximaciones son, en orden creciente de exactitud, las soluciones dadas por los métodos de HFB, Lipkin-Nogami (LN), PLN, RVAP y VAP. Esta comparación se hará en primer lugar con dos hamiltonianos de apareamiento sencillos en los que se puede hallar la solución exacta y con los que podremos extraer las principales características de estas aproximaciones. En particular, podremos justificar los métodos de LN y PLN, frecuentemente usados con la interacción de Skyrme y los modelos relativistas, como una aproximación del método RVAP que explora como grado de libertad relevante las fluctuaciones en el número de partículas (sec. 5.2.5). Posteriormente realizaremos el mismo tipo de comparación con el estudio de las correlaciones de apareamiento en el núcleo  $^{54}\text{Cr}$  calculado con la interacción de Gogny con diferentes aproximaciones (sec. 5.3.2). Pero antes de analizar estos sistemas, se describirá el método de proyección exacta a buen número de partículas en la siguiente sección (sec. 5.1).

## 5.1. Conceptos generales de la proyección a buen número de partículas

Usando los conceptos generales de restauración de las simetrías que se han visto en el capítulo 1 (sec. 4.2.2) se pueden construir funciones de onda que sean autoestados del operador número a partir de funciones de campo medio ( $|\Phi\rangle$ ) mediante el mecanismo de la proyección. Para ello, se aplica a la función de onda producto un operador que proyecta dicho estado al subespacio de funciones con buen número de partículas. Este operador de proyección tiene la siguiente forma (ec. 4.37) [12, 2]:

$$P^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi \quad (5.3)$$

Veamos a continuación que aplicando el operador (ec. 5.3) sobre un estado de HFB  $|\Phi\rangle$  se construye un autoestado de  $\hat{N}$ . Para ello desarrollamos  $|\Phi\rangle$  en la base de autoestados de  $\hat{N}$ :

$$|\Phi\rangle = \sum_k A_k |N_k\rangle \quad (5.4)$$

donde,

$$\hat{N}|N_k\rangle = N_k|N_k\rangle \quad (5.5)$$

Aplicando el proyector al estado  $|\Phi\rangle$  se tiene:

$$\begin{aligned} P^N|\Phi\rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} |\Phi\rangle d\varphi = \sum_k \frac{A_k}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} e^{i\varphi \hat{N}} |N_k\rangle d\varphi = \\ &= \sum_k A_k |N_k\rangle \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N_k-N)} d\varphi = \sum_k A_k |N_k\rangle \delta_{N_k, N} = A_N |N\rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

En notación de Dirac podemos escribir el proyector a buen número de partículas como:

$$P^N = |N\rangle\langle N| \quad (5.7)$$

De esta expresión es obvio que  $P^N$  cumple las propiedades de los proyectores:

$$(P^N)^\dagger = P^N \quad ; \quad (P^N)^2 = P^N \quad (5.8)$$

### 5.1. Conceptos generales de la proyección a buen número de partículas

---

Las funciones de onda proyectadas, dependiendo de si en el sistema tenemos un sólo tipo de fermiones, o protones y neutrones como en los núcleos atómicos, serán:

$$|\Phi^N(\vec{q})\rangle = P^N |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (5.9)$$

$$|\Phi^{NZ}(\vec{q})\rangle = P^N P^Z |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (5.10)$$

En la práctica es habitual sustituir la integral definida en la ecuación (ec. 5.3) por una suma discreta (discretización de Fomenko) [13]:

$$P^N \rightarrow P_L^N = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L e^{i\varphi_l(\hat{N}-N)} \quad \varphi_l = \frac{\pi}{L} l \quad (5.11)$$

#### 5.1.1. Energía proyectada

A continuación vamos a calcular el valor esperado del hamiltoniano con funciones de onda tipo HFB proyectadas a buen número de partículas. Para ello haremos uso de la notación y de las expresiones más generales que aparecen en los apéndices A y B y supondremos que en el sistema hay dos tipos de fermiones (protones y neutrones). Las fórmulas para un sólo tipo de fermiones se simplifican de manera trivial.

La energía en este caso vendrá dada por la expresión:

$$e^{NZ}(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle} \quad (5.12)$$

Desarrollando los proyectores que aparecen en la ecuación anterior tenemos para la norma:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = \\ \frac{1}{L} \sum_{l_N=1}^L \frac{1}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (5.13)$$

y para el numerador:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle &= \frac{1}{L} \sum_{l_N=1}^L \frac{1}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \cdot \\ \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle} &\cdot \langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

Si las funciones de onda de tipo HFB no mezclan el isospín se tiene que:

$$|\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi_Z(\vec{q})\rangle |\Phi_N(\vec{q})\rangle \quad (5.15)$$

Con esta factorización, la norma queda:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = n^Z(\vec{q}) n^N(\vec{q}) \quad (5.16)$$

$$n^{N_\tau}(\vec{q}) \equiv \frac{1}{L} \sum_{l_{N_\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} \langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle \quad (5.17)$$

donde el solape  $n(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}}) \equiv \langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle$  se calcula mediante la fórmula de Onishi [14, 15, 16] (ec. A.31 con  $\beta = 0, q = q'$ ):

$$n(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \left( e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} \text{Tr}(1)} \text{Det} [T_{22}(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}})] \right)^{1/2} \quad (5.18)$$

$$T_{22}(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}}) = e^{i\varphi_{l_{N_\tau}}} V^T(q) V^*(q) + e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}}} U^T(q) U^*(q) \quad (5.19)$$

Las matrices  $U(q), V(q)$  son las correspondientes a la transformación de HFB definidas en la ecuación (ec. 4.4)

Por otro lado, para el cálculo del solape dado en la ecuación (ec. 5.14) usamos el teorema de Wick extendido y la expresión del hamiltoniano en la base de partícula independiente (ec. 4.1), obteniendo finalmente (véanse los apéndices A-B):

$$\begin{aligned} h^{NZ}(\vec{q}) &\equiv \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = \\ & n^N(\vec{q}) n^Z(\vec{q}) \text{Tr} [t \rho^{P,10,Z}(\vec{q})] + \\ & \frac{n^N(\vec{q})}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZZ}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \right] n^Z(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) + \\ & n^N(\vec{q}) n^Z(\vec{q}) \text{Tr} [t \rho^{P,10,N}(\vec{q})] + \\ & \frac{n^Z(\vec{q})}{L} \sum_{l_N=1}^L e^{-i\varphi_{l_N} N} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NN}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \right] n^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) + \\ & \frac{n^Z(\vec{q})}{L} \sum_{l_N=1}^L e^{-i\varphi_{l_N} N} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZN}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \rho^{P,10,Z}(\vec{q}) \right] n^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) + \end{aligned}$$

### 5.1. Conceptos generales de la proyección a buen número de partículas

$$\begin{aligned}
& \frac{n^N(\vec{q})}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NZ}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \rho^{P,10,N}(\vec{q}) \right] n^Z(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) - \\
& \frac{n^N(\vec{q})}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \right] n^Z(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) - \\
& \frac{n^Z(\vec{q})}{L} \sum_{l_N=1}^L e^{-i\varphi_{l_N} N} \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \right] n^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \quad (5.20)
\end{aligned}$$

donde se han definido la matriz densidad y los tensores de apareamiento generalizados (ecs. A.32, A.33, A.34) así como los campos de Hartree-Fock y apareamiento (ecs. B.49, B.50).

$$\rho_{ll'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) = \left( e^{i\varphi_{l_{N\tau}}} V^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) V^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (5.21)$$

$$\kappa_{ll'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) = \left( e^{i\varphi_{l_{N\tau}}} V^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) U^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (5.22)$$

$$\kappa_{ll'}^{01,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) = - \left( e^{-i\varphi_{l_{N\tau}}} U^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) V^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (5.23)$$

$$\Gamma_{ll'}^{10,N\tau,N\tau'}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) = \sum_{kk'} \bar{v}_{lkl'k'} \rho_{kk'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) \quad (5.24)$$

$$\Delta_{ll'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \bar{v}_{ll'kk'} \kappa_{kk'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) \quad (5.25)$$

$$(5.26)$$

Además, se ha definido la matriz densidad proyectada como:

$$\rho_{ll'}^{P,10,N\tau}(\vec{q}) \equiv \frac{1}{L n^{N\tau}(\vec{q})} \sum_{l_{N\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l_{N\tau}} N\tau} \rho_{ll'}^{10,N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) n^{N\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N\tau}}) \quad (5.27)$$

Por tanto, la energía proyectada a buen número de partículas se puede expresar como la suma de los términos cinético, de HF y de apareamiento:

$$e^{NZ}(\vec{q}) = e_{\text{Cin}}^{NZ}(\vec{q}) + e_{\text{HF}}^{NZ}(\vec{q}) + e_{\text{Pair}}^{NZ}(\vec{q}) \quad (5.28)$$

donde finalmente se tiene:

$$e_{\text{Cin}}^{NZ}(\vec{q}) = \text{Tr} [t \rho^{P,10,Z}(\vec{q})] + \text{Tr} [t \rho^{P,10,N}(\vec{q})] \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned}
 e_{\text{HF}}^{NZ}(\vec{q}) &= \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZZ}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \right] y^Z(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \\
 &+ \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NN}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \right] y^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \\
 &+ \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NN}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \right] y^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \\
 &+ \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NZ}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \rho^{P,10,N}(\vec{q}) \right] y^Z(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \\
 &+ \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZN}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \rho^{P,10,Z}(\vec{q}) \right] y^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \quad (5.30)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_{\text{Pair}}^{NZ}(\vec{q}) &= - \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \right] y^Z(\vec{q}, \varphi_{l_Z}) \\
 &- \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \right] y^N(\vec{q}, \varphi_{l_N}) \quad (5.31)
 \end{aligned}$$

$$y^{N_\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \frac{e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}}} n^{N_\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}})}{\sum_{l_{N_\tau}} e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}}} n^{N_\tau}(\vec{q}, \varphi_{l_{N_\tau}})} \quad (5.32)$$

### 5.1.2. Divergencias en la energía proyectada

Anguiano, Egido y Robledo demostraron (véase Ref. [7]) que la energía proyectada dada por la expresión de arriba puede contener términos divergentes cuando la ocupación de un nivel en la base canónica es  $v_k^2 = 1/2$  y el ángulo *gauge* es  $\varphi_l = \pi/2$ . En esos casos la matriz  $T_{22}$  se vuelve singular y, por tanto, la matriz densidad y los tensores de apareamiento divergen. Los mismos autores también demostraron que estos polos desaparecen únicamente cuando se cumplen las siguientes condiciones:

1. Se tienen que considerar todos los términos (HF y apareamiento) sin despreciar ninguno. Esto es importante ya que a nivel de campo medio se suelen despreciar tanto algunos términos de Fock (o tenerlos en cuenta de manera aproximada) como algunos términos de apareamiento. En la misma referencia (Ref. [7]) se estudia, con la interacción de Gogny, la convergencia de la energía proyectada despreciando y sin despreciar los términos de apareamiento de Coulomb y de espín-órbita así como el

término de intercambio de Coulomb (que se trata en la aproximación de Slater). Ahí se observa que en los puntos donde se tiene  $v_k^2 = 1/2$  sólo se obtiene la convergencia cuando se incluyen todos los términos de manera exacta.

2. Se tiene que considerar la misma interacción en los canales de HF y de apareamiento para que se produzca la cancelación de las divergencias. Este caso es incluso más dramático ya que es la base de las interacciones de Skyrme y relativistas. Recientemente Bender y Duguet han mostrado explícitamente la aparición de estas divergencias en los cálculos con la interacción de Skyrme [21].

Además, estas divergencias no se presentan raramente. Por un lado, cuando se estudia la energía proyectada en función de un parámetro continuo, como, por ejemplo, la deformación cuadrupolar o las fluctuaciones en el número de partículas, con toda seguridad habrá puntos en la superficie de energía potencial para los que se verificará la condición  $v_k^2 = 1/2$ . Por otro lado, si se minimiza de manera autoconsistente la energía proyectada, como en el método VAP que describiremos más adelante, el sistema se dirige variacionalmente hacia las divergencias que aparecen si no se tienen en cuenta los dos puntos anteriores, con lo que finalmente el proceso de minimización de la energía no converge nunca. Por ello, en los cálculos que se presentan en este trabajo se incluyen todos los términos posibles de la interacción.

#### 5.1.3. Término dependiente de la densidad

Una de las dificultades que presentan en general las teorías basadas en el generador de coordenadas con interacciones dependientes de la densidad es la ambigüedad que surge en la determinación de la densidad espacial que aparece en el hamiltoniano [17, 18, 7, 19, 20]. Esto se debe a que dicha densidad depende de los estados con los que se calcula. A nivel de campo medio (HFB) la densidad espacial está unívocamente determinada mientras que en las teorías proyectadas se tiene que escoger una prescripción que tiene que cumplir unos requisitos mínimos. Los más importantes son que la energía sea una cantidad escalar y que sea real. Además, se pueden imponer otras condiciones de consistencia con el campo medio subyacente que dan lugar a la denominada prescripción mixta y que es la más apropiada cuando se restauran las simetrías espaciales, como el momento angular o la paridad espacial. No obstante, en este trabajo hemos empleado la densidad proyectada a buen número de partículas como la prescripción para el término dependiente de la densidad en este grado de aproximación [17, 18, 7]:

$$\rho_{\vec{q}}^{Z,N}(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{\rho}(\vec{r}) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\rho}(\vec{r}) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle} \quad (5.33)$$

Esta prescripción tiene la ventaja de que el término de la energía correspondiente no presenta divergencias, algo que sí ocurre con la prescripción mixta, aunque dicha divergencia es integrable [7]. Además, hace el problema mucho menos costoso desde el punto de vista computacional y las diferencias entre una y otra prescripción son pequeñas [7].

## 5.2. Métodos de proyección a buen número de partículas

La calidad de las distintas aproximaciones a la solución exacta en el marco de la proyección a buen número de partículas (las correlaciones de apareamiento que puedan incluir dichas aproximaciones) depende del método con el que se determine la función de onda intrínseca de tipo producto  $|\Phi(\vec{q})\rangle$  que aparece en la ecuación 5.12. A continuación se describen los distintos métodos que se han empleado en este trabajo para determinar dicha función de onda intrínseca.

### 5.2.1. Hartree-Fock-Bogoliubov Proyectado (PAV)

En este caso la función de onda tipo producto se determina resolviendo en primer lugar las ecuaciones de HFB constreñidas con los parámetros  $\{\vec{q}\}$  (ecs. 4.16-4.17):

$$\delta \left[ \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \hat{Q} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right]_{|\Phi(\vec{q})\rangle=|\text{HFB}(\vec{q})\rangle} = 0 \quad (5.34)$$

Una vez obtenida la solución de la ecuación anterior se proyecta a buen número de partículas. Por tanto, es un método de proyección después de la variación (PAV). Con ello se obtienen las superficies de energía potencial proyectadas PAV:

$$e_{\text{PAV}}^{NZ}(\vec{q}) = \frac{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{HFB}(\vec{q}) | P^N P^Z | \text{HFB}(\vec{q}) \rangle} \quad (5.35)$$



### 5.2.2. Variación Después de la Proyección (VAP)

La función de onda intrínseca en el método VAP se halla minimizando la energía proyectada usando como parámetros variacionales los coeficientes  $U, V$  de la transformación de HFB (ec. 4.4). Para ello se resuelven las ecuaciones de HFB proyectadas que provienen de aplicar el principio variacional al funcional siguiente (ec. 4.39):

$$\delta \left[ \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{Q} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right]_{|\Phi(\vec{q})|=|\text{VAP}(\vec{q})|} = 0 \quad (5.36)$$

Obviamente este método es mucho más costoso desde el punto de vista computacional que el anterior ya que requiere de la evaluación de la energía proyectada en cada paso del proceso iterativo hacia la convergencia, mientras que en el PAV sólo se proyecta una sola vez. Además, como se mencionó en la sección (sec. 5.1.2), este método es mucho más sensible a la aparición de divergencias en el sistema. Por tanto, se deben incluir exactamente todos los términos de la interacción, incluso aquellos que son pequeños a nivel de campo medio y cuya evaluación requiere mucho tiempo de computación (el intercambio de Coulomb es un ejemplo).

Con las funciones de onda halladas se pueden construir las superficies de energía potencial VAP:

$$e_{\text{VAP}}^{NZ}(\vec{q}) = \frac{\langle \text{VAP}(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \text{VAP}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{VAP}(\vec{q}) | P^N P^Z | \text{VAP}(\vec{q}) \rangle} \quad (5.37)$$

### 5.2.3. Lipkin-Nogami (LN) y Lipkin-Nogami Proyectado (PLN)

El método de Lipkin-Nogami se desarrolló originariamente para restaurar de manera aproximada la simetría del número de partículas antes de la variación [22, 23, 24]. Para ello se trata de eliminar del valor esperado de la energía la parte que proviene de las fluctuaciones en el número de partículas. Sin embargo, las funciones de onda prueba siguen siendo de tipo producto que violan la simetría del número de partículas. Este método se puede estudiar como un caso particular del método de Kamlah [25, 17, 18] donde la energía proyectada VAP se puede expresar como un desarrollo en serie de

potencias del operador  $\Delta\hat{N} = \hat{N} - N^1$ :

$$e_{\text{VAP}}^N = \sum_{m=0}^M h_m \left( \Delta\hat{N} \right)^m \quad (5.38)$$

En la prescripción de Lipkin-Nogami se llega hasta segundo orden en este desarrollo y se minimiza el funcional:

$$\delta \left[ \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - h_2 (\Delta\hat{N})^2 - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \vec{\hat{Q}} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right]_{|\Phi(\vec{q})\rangle = |\text{LN}(\vec{q})\rangle} = 0 \quad (5.39)$$

donde  $\lambda_N$  resulta ser el multiplicador de Lagrange que hace que se tenga el valor promedio correcto mientras que  $h_2$  es un parámetro que no entra en la variación y cuya expresión se obtiene del método de Kamlah <sup>2</sup>:

$$h_2 = \frac{\langle \hat{H} (\Delta\hat{N})^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle (\Delta\hat{N})^2 \rangle - \frac{\langle \hat{H} \Delta\hat{N} \rangle \langle (\Delta\hat{N})^3 \rangle}{\langle (\Delta\hat{N})^2 \rangle}}{\langle (\Delta\hat{N})^4 \rangle - \langle (\Delta\hat{N})^2 \rangle^2 - \frac{\langle (\Delta\hat{N})^3 \rangle^2}{\langle (\Delta\hat{N})^2 \rangle}}. \quad (5.40)$$

La aproximación a la energía VAP dada por el método de LN se calcula con la siguiente expresión:

$$e_{\text{LN}}^N(\vec{q}) = \frac{\langle \text{LN}(\vec{q}) | \hat{H} | \text{LN}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{LN}(\vec{q}) | \text{LN}(\vec{q}) \rangle} - h_2 \frac{\langle \text{LN}(\vec{q}) | (\Delta\hat{N})^2 | \text{LN}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{LN}(\vec{q}) | \text{LN}(\vec{q}) \rangle} \quad (5.41)$$

Debido a que, tanto la expansión de Kamlah está restringida a un orden determinado como que el parámetro  $h_2$  no entra en la minimización, el método de LN no es puramente variacional y en ocasiones da una energía más baja que la energía VAP. Sin embargo, las funciones de onda de tipo producto halladas con la prescripción de LN consiguen incluir siempre correlaciones de apareamiento, evitando de esta manera las transiciones de fase espurias que aparecen en la aproximación de HFB y que una proyección PAV mantiene. Por ello, es habitual emplear el método de LN para hallar funciones de onda intrínsecas y posteriormente proyectarlas exactamente a buen número de partículas. Con ello se construyen de manera equivalente a las expresiones

<sup>1</sup>Para simplificar la notación suponemos que sólo hay un tipo de partículas  $N$ . La extensión al caso de tener protones y neutrones se hace de manera trivial.

<sup>2</sup>Se asume que los promedios  $\langle \rangle$  se calculan entre los estados  $|\text{LN}\rangle$ .

(ecs. 5.35,5.37) las superficies de energía potencial proyectadas:

$$e_{\text{PLN}}^{NZ}(\vec{q}) = \frac{\langle \text{LN}(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \text{LN}(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{LN}(\vec{q}) | P^N P^Z | \text{LN}(\vec{q}) \rangle} \quad (5.42)$$

Este es el denominado método de Lipkin-Nogami Proyectado (PLN) y se usa de manera sistemática en los cálculos más allá de campo medio con la interacción de Skyrme (véase Ref. [8] y las referencias que allí se incluyen) y, más recientemente, con las interacciones relativistas [9]. Además, este método también se ha implementado con la interacción de Gogny en la referencia (Ref. [26]), en donde se estudian las propiedades de los estados fundamentales de los isótopos del estaño con diferentes aproximaciones (HFB, LN, PAV, PLN y VAP).

#### 5.2.4. Variación Después de la Proyección Restrignida (RVAP)

El método general de la Variación Después de la Proyección Restrignida (RVAP) se basa en explorar las superficies de energía potencial proyectadas PAV definidas a lo largo de los grados de libertad más relevantes. De esta manera, la solución vendrá dada por el mínimo de esa superficie. En el caso de la proyección a buen número de partículas, si nos basamos en la expansión de Kamlah (ec. 5.38) tenemos que:

$$e_{\text{VAP}}^N(\vec{q}) \approx \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} - h_2 \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | (\Delta \hat{N})^2 | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} - h_4 \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | (\Delta \hat{N})^4 | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} - \dots \quad (5.43)$$

Por tanto, los grados libertad más relevantes en este caso serán las fluctuaciones en el número de partículas  $(\Delta \hat{N})^2$  y, posteriormente, el operador  $(\Delta \hat{N})^4$ . Para unos valores de los parámetros intrínsecos  $\{\vec{q}\}$  fijos, construimos la superficie de energía potencial proyectada (PPES)<sup>3</sup>:

$$e^N((\Delta N)^2, \vec{q}) = \frac{\langle \text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q}) | \hat{H} P^N | \text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q}) \rangle}{\langle \text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q}) | P^N | \text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q}) \rangle} \quad (5.44)$$

donde las funciones de onda  $|\text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q})\rangle$  se determinan resolviendo la

---

<sup>3</sup>De nuevo, para simplificar la notación suponemos que sólo hay un tipo de partículas  $N$

ecuación de HFB con ligaduras correspondiente:

$$\delta \left[ \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_{\Delta N^2} (\Delta \hat{N})^2 - \vec{\lambda}_{\vec{q}} \vec{Q} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right]_{|\Phi\rangle=|\text{HFB}((\Delta N)^2, \vec{q})\rangle} = 0 \quad (5.45)$$

Eligiendo la función de onda que da el mínimo de la superficie (ec. 5.44) obtenemos una solución aproximada de la energía VAP:

$$e_{\text{RVAP}_1}^N((\Delta N)_{\min}^2, \vec{q}) = \frac{\langle \text{RVAP}_1(\vec{q}) | \hat{H} P^N | \text{RVAP}_1(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{RVAP}_1(\vec{q}) | P^N | \text{RVAP}_1(\vec{q}) \rangle} \quad (5.46)$$

Una de las grandes ventajas que tiene el método RVAP es que se puede extender de manera directa añadiendo más ligaduras al cálculo de campo medio y construyendo superficies de energía potencial con más dimensiones que posteriormente se proyectan a buen número de partículas. Por ejemplo, en este caso se podría explorar también el grado de libertad  $(\Delta \hat{N})^4$  obteniéndose:

$$e_{\text{RVAP}_2}^N [((\Delta N)^2, (\Delta N)^4)_{\min}, \vec{q}] = \frac{\langle \text{RVAP}_2(\vec{q}) | \hat{H} P^N | \text{RVAP}_2(\vec{q}) \rangle}{\langle \text{RVAP}_2(\vec{q}) | P^N | \text{RVAP}_2(\vec{q}) \rangle} \quad (5.47)$$

### 5.2.5. Justificación del método de Lipkin-Nogami

En esta sección se justifica el método de LN y su versión proyectada (PLN) desde un punto de vista variacional [27]. En primer lugar notamos que, comparando las ecuaciones variacionales (ec. 5.45) y (ec. 5.39), podemos construir la solución de LN  $|\text{LN}\rangle$  con el método  $\text{RVAP}_1$  si se aplica la ligadura  $\langle \Phi | (\Delta N)^2 | \Phi \rangle = (\Delta N)_{\text{LN}}^2$ . Al final del proceso de convergencia de la ecuación (ec. 5.45) se tendrá necesariamente la condición:

$$\lambda_{\Delta N^2}((\Delta N)_{\text{LN}}^2) = h_2 \quad (5.48)$$

Es decir, la función de onda de LN pertenece al subespacio de funciones de onda de campo medio (HFB) constreñidas a tener valores determinados de las fluctuaciones del número de partículas:

$$|\text{LN}\rangle \in \{|\text{HFB}(\Delta N^2)\rangle\} \quad (5.49)$$

Con este subespacio de funciones de onda podemos evaluar la energía proyectada aproximada utilizando la expansión de Kamlah a segundo orden:

$$e^N(\Delta N^2) \approx \langle \text{HFB}(\Delta N^2) | \hat{H} | \text{HFB}(\Delta N^2) \rangle$$

$$- h_2 \langle \text{HFB}(\Delta N^2) | \hat{H} | \text{HFB}(\Delta N^2) \rangle = e_{\text{HFB}}(\Delta N^2) - h_2 \Delta N^2 \quad (5.50)$$

Si ahora hallamos el mínimo de la superficie de energía potencial definida por la ecuación anterior, suponiendo que el parámetro  $h_2$  es independiente del valor de  $\Delta N^2$  (algo que en general no es cierto) obtenemos:

$$\frac{\partial e^N(\Delta N^2)}{\partial(\Delta N^2)} = 0 = \frac{\partial e_{\text{HFB}}(\Delta N^2)}{\partial(\Delta N^2)} - h_2 \quad (5.51)$$

El primer sumando del último término no es más que la definición del multiplicador de Lagrange:

$$\frac{\partial e_{\text{HFB}}(\Delta N^2)}{\partial(\Delta N^2)} = \lambda_{\Delta N^2} \quad (5.52)$$

obteniendo la condición de LN ( $\lambda_{\Delta N^2} = h_2$ ) con esta minimización (ec. 5.51).

A partir de esta derivación podemos concluir que el método de LN proviene de minimizar la energía proyectada aproximada a segundo orden en la expansión de Kamlah en el espacio variacional definido por las funciones de onda de HFB constreñidas a valores de  $\Delta N^2$ . Además, podemos extraer tres conclusiones importantes:

1. La energía de LN dará resultados razonables cuanto más se aproxime la expansión de Kamlah a segundo orden a la energía proyectada exacta. Esto ocurre para valores de  $\Delta N^2$  grandes [2, 17, 18].
2. La energía de LN estará en el mínimo de la superficie de energía potencial definida por la expansión de Kamlah (ec. 5.50) cuando el parámetro  $h_2$  sea más o menos independiente de  $\Delta N^2$ .
3. Debido a que se cumple la condición (ec. 5.49), el método PLN, que consiste en proyectar exactamente el estado de LN, produce una energía que pertenece a la superficie de energía proyectada a lo largo de la dirección de  $\Delta N^2$ . El método RVAP<sub>1</sub> descrito más arriba consiste precisamente en hallar el mínimo de tal superficie y dará una energía igual o más baja que el método PLN, aproximándose más a la solución VAP. Por tanto, el método PLN sólo es capaz de explorar la superficie de energía potencial proyectada a lo largo del grado de libertad  $\Delta N^2$  y, además, no lo hace de manera óptima.

### 5.3. Comparaciones numéricas

En los siguientes apartados se comparan los resultados dados por los métodos de proyección a buen número de partículas descritos anteriormente cuando se aplican al estudio de las correlaciones de apareamiento.

#### 5.3.1. Hamiltonianos de apareamiento reducido

En primer lugar estudiaremos dos sistemas sencillos que pongan de relieve las principales características de las aproximaciones mencionadas en la sección previa. El primer modelo se corresponde con el siguiente hamiltoniano (*picket-fence model*):

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \epsilon_k (c_k^\dagger c_k + c_{\bar{k}}^\dagger c_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'=1}^N c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger c_{\bar{k}'} c_{k'} \quad (5.53)$$

donde  $N$  es el número de niveles doblemente degenerados,  $k$  y  $\bar{k}$  corresponden a los estados normales e inversos en el tiempo con energías de partícula independiente  $\epsilon_k$ ,  $c_k^\dagger$  y  $c_k$  crean y destruyen estados de partícula independiente respectivamente y, finalmente,  $G$  es la intensidad de la interacción de apareamiento.

Este hamiltoniano se ha usado para estudiar las propiedades de apareamiento tanto en física nuclear [3, 28] como en física de la materia condensada [29, 30, 31, 32]. En este caso se ha usado un espectro de partícula independiente con el mismo espaciado entre los niveles  $\epsilon_k = kd$  y el número de partículas se escoge igual al número de niveles doblemente degenerados  $N_0 = N = 10$ , es decir, se trabaja en la aproximación de semi-llenado.

El segundo es un modelo de apareamiento de dos niveles cuyo hamiltoniano es esencialmente el mismo que el dado en la ecuación (ec. 5.53) sólo que en este caso  $\epsilon_k = -d$  para  $k = 1, \dots, N/2$  y  $\epsilon_k = d$  para  $k = N/2 + 1, \dots, N$ . También se impone la condición de semi-llenado con  $N_0 = N = 10$ . Este modelo ha sido ampliamente utilizado para estudiar distintas aproximaciones concernientes a la restauración del número de partículas [33, 34, 35]. En adelante nos referiremos al primer modelo como  $\mathcal{H}_1$  y al modelo de dos niveles como  $\mathcal{H}_2$ .

Una medida de las correlaciones de apareamiento que incluyen las distintas aproximaciones es la energía de condensación, definida como la diferencia entre la energía del estado fundamental  $e_0$  menos la correspondiente a la

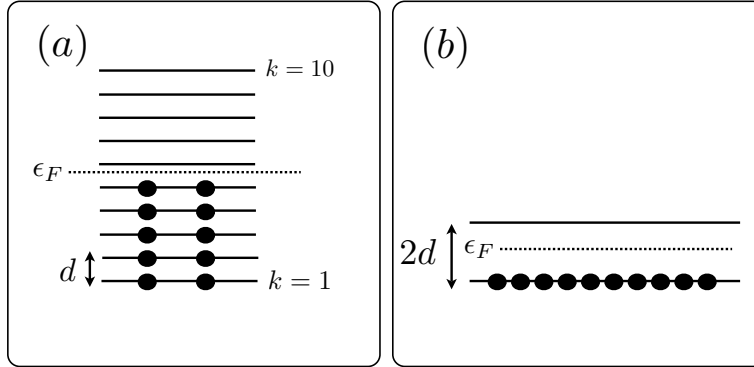


Figura 5.1: Imagen esquemática de la configuración de Hartree-Fock para los modelos de apareamiento reducido (a)  $\mathcal{H}_1$  y (b)  $\mathcal{H}_2$ , donde  $\epsilon_F$  es la energía de Fermi y se escoge  $N = N_0 = 10$ .

configuración de Hartree-Fock:

$$e^{\text{cond}} = e_0 - \left( 2 \sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k - GN/2 \right) \quad (5.54)$$

En la figura 5.1 representamos esquemáticamente la configuración del sistema completamente descorrelacionada, que tiene una energía dada por el segundo sumando de la ecuación (ec. 5.54).

Como sólo hay un tipo de fermiones las expresiones que aparecen en la sección anterior se simplifican. Además, el campo medio en este caso también se ha simplificado y se realiza en la aproximación BCS en lugar de hacer la transformación de HFB más general. En la tabla 5.1 se hace un resumen de las distintas aproximaciones descritas en la sección anterior y aplicadas a este sistema en particular. Las ecuaciones variacionales se han resuelto con el método del gradiente ya que resulta muy adecuado para incluir muchas ligaduras en el sistema [36].

## Resultados

En la figura 5.2(a) se representan las energías de condensación (en unidades del parámetro  $d$ ) como función de la intensidad de la interacción (en términos del parámetro  $\chi = G(N_0 - 1)/(2d)$ ) para las distintas aproximaciones que aparecen en la tabla 5.1 calculadas para el modelo  $\mathcal{H}_1$ . Como se

Nombre	Método variacional
BCS	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N}   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{BCS}\rangle} = 0$
PAV	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N}   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{BCS}\rangle} = 0$
LN	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - h_2 \Delta \hat{N}^2   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{LN}\rangle} = 0$
PLN	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - h_2 \Delta \hat{N}^2   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{LN}\rangle} = 0$
RVAP <sub>1</sub>	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_{\Delta N^2} \Delta \hat{N}^2   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{RVAP}_1(\Delta N^2)\rangle} = 0$
RVAP <sub>2</sub>	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_{\Delta N^2} \Delta \hat{N}^2 - \lambda_{\Delta N^4} \Delta \hat{N}^4   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{RVAP}_2(\Delta N^2, \Delta N^4)\rangle} = 0$
VAP	$\delta \left( \langle \Phi   \hat{H} [P^N]   \Phi \rangle \right)_{ \Phi\rangle= \text{VAP}\rangle} = 0$
Nombre	Energía
BCS	$e_{\text{BCS}} = \langle \text{BCS}   \hat{H}   \text{BCS} \rangle$
PAV	$e_{\text{PAV}} = \langle \text{BCS}   \hat{H} [P^N]   \text{BCS} \rangle$
LN	$e_{\text{LN}} = \langle \text{LN}   \hat{H} - h_2 \Delta \hat{N}^2   \text{LN} \rangle$
PLN	$e_{\text{PLN}} = \langle \text{LN}   \hat{H} [P^N]   \text{LN} \rangle$
RVAP <sub>1</sub>	$e_{\text{RVAP}_1} = \min \left[ \langle \text{RVAP}_1(\Delta N^2)   \hat{H} [P^N]   \text{RVAP}_1(\Delta N^2) \rangle \right]$
RVAP <sub>2</sub>	$e_{\text{RVAP}_2} = \min \left[ \langle \text{RVAP}_2(\Delta N^2, \Delta N^4)   \hat{H} [P^N]   \text{RVAP}_2(\Delta N^2, \Delta N^4) \rangle \right]$
VAP	$e_{\text{VAP}} = \langle \text{VAP}   \hat{H} [P^N]   \text{VAP} \rangle$
$[P^N] \equiv P^N / (\langle \Phi   P^N   \Phi \rangle)$	

Tabla 5.1: Resumen de las distintas aproximaciones que se usan para resolver los hamiltonianos de apareamiento reducidos



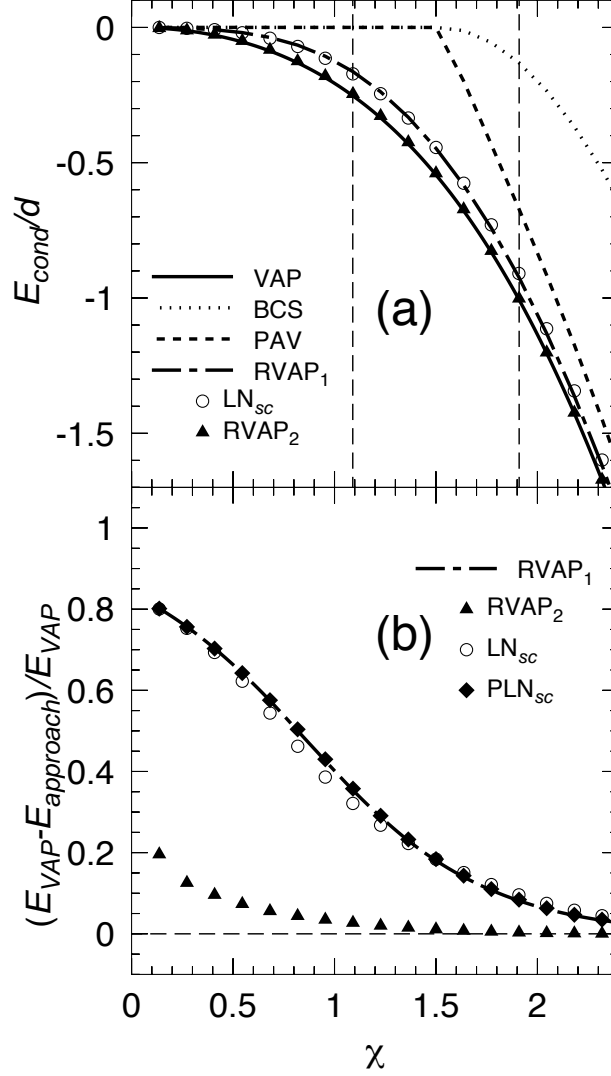


Figura 5.2: (a) Energía de condensación (en unidades de  $d$ ) como función de la intensidad de la interacción de apareamiento (en términos del parámetro  $\chi = G(N_0 - 1)/(2d)$ ) para las aproximaciones BCS (línea fina de puntos), VAP (línea continua), PAV (línea gruesa de puntos), RVAP<sub>1</sub> (línea de puntos y rayas), LN (círculos) y RVAP<sub>2</sub> (triángulos). Las líneas verticales indican los valores de  $\chi$  para los que se hace un análisis detallado de los métodos RVAP<sub>1</sub>, LN, PLN y RVAP<sub>2</sub> (b) Diferencias normalizadas con respecto de la solución VAP para las distintas aproximaciones.

puede apreciar, la mejor aproximación de entre todas a la energía exacta del problema, es decir, la aproximación variacional que da la menor energía, es el método VAP (línea continua). En este caso, la energía de condensación  $e_{\text{VAP}}^{\text{cond}}$  decrece monótonamente a medida que se aumenta la intensidad de la interacción siendo además distinta de cero para todo el rango de valores de  $\chi$ . Sin embargo, la solución de campo medio se comporta de manera diferente (línea fina de puntos). En este caso se aprecia que hasta un valor de  $\chi = 1.5$  la energía de condensación es cero y a partir de ahí decrece de manera continua. Este comportamiento se corresponde con una transición de fase espuria debido a que se trata de un sistema finito. En la parte donde no se obtienen correlaciones de apareamiento (región normal-conductora) se tienen soluciones de tipo producto que conservan la simetría del número de partículas, es decir, soluciones de tipo Hartree-Fock. Una vez que la intensidad de la interacción alcanza un valor umbral se produce una ruptura espontánea de la simetría y las funciones de onda de tipo producto son capaces de incluir correlaciones de apareamiento (región superconductora). Como se aprecia en la figura 5.2(a) la aproximación PAV mantiene esta transición de fase. En la región normal-conductora no se obtienen correlaciones de apareamiento extra al proyectar a buen número de partículas debido a que las funciones de onda correspondientes son ya autoestados de  $\hat{N}$ . Sin embargo, en la región superconductora sí se aprecia una ganancia significativa en la energía de condensación al restaurar la simetría, aunque todavía la solución PAV está lejos de la correspondiente VAP.

Como se ha mencionado previamente, tanto las aproximaciones BCS como PAV se pueden mejorar estudiando las superficies de energía potencial proyectadas definidas a lo largo de los grados de libertad más relevantes en el sistema (método RVAP). En primer lugar analizaremos la dependencia de la energía proyectada con las fluctuaciones del número de partículas  $\Delta N^2$  (método RVAP<sub>1</sub>).

En la figura 5.3 se muestran las superficies de energía en la aproximación de campo medio (*Constrained-BCS*, CBCS) y proyectada (*Projected-Constrained-BCS*, PCBCS) en función de  $\Delta N^2$ . Los resultados del panel (a) de la figura se calculan con un valor de la intensidad de la interacción  $\chi = 1.1$  que se corresponde con la región normal-conductora. Aquí se muestra claramente que la superficie CBCS tiene un mínimo (solución BCS en la figura 5.2(a)) localizado en  $\Delta N^2 = 0$  con una energía de condensación igual a cero y una función de onda que es autoestado del operador número. Por tanto, la proyección de este mínimo (solución PAV) coincide con la solución de campo medio como se ve en la figura 5.2(a) en toda la región normal-conductora. Sin

### 5.3. Comparaciones numéricas

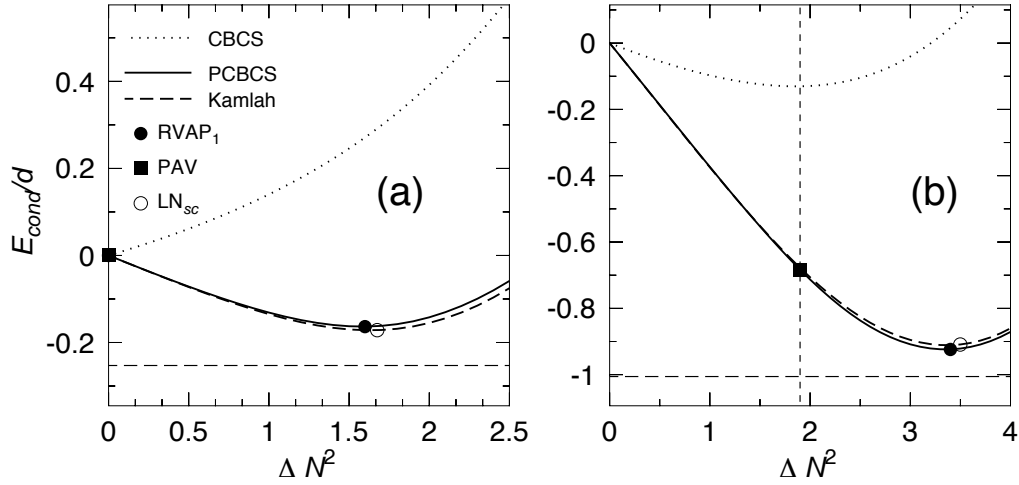


Figura 5.3: Superficies de energía como función de las fluctuaciones en el número de partículas para las aproximaciones BCS (línea de puntos, CBCS) y su proyección a buen número de partículas (línea continua, PCBCS). Los mínimos de dichas curvas corresponden a la solución BCS y PAV (cuadrado). En el panel (a) se muestran los resultados para un valor de  $\chi = 1.1$  en la región normal-conductora mientras que en el panel (b) el valor de  $\chi = 1.9$  está en la región superconductora. La línea horizontal marca el valor de la solución VAP en cada caso. El mínimo de la curva proyectada es la solución  $RVAP_1$  (círculo negro). Además, se representa la energía proyectada aproximada a segundo orden en la expansión de Kamlah (línea discontinua) que contiene a la solución de Lipkin-Nogami autoconsistente (círculo blanco, LN).

embargo, si proyectamos toda la curva (PCBCS) observamos que se obtiene un mínimo más profundo en  $\Delta N^2 = 1.6$  y  $e_{RVAP_1}^{\text{cond}} = -0.16d$ . En el panel (b) se muestran resultados similares con un valor de  $\chi = 1.9$  en la región superconductora. En este caso la curva de campo medio (CBCS) tiene un mínimo (solución BCS) en  $(\Delta N^2 = 1.9, e_{\text{BCS}}^{\text{cond}} = -0.1d)$  que rompe la simetría del número de partículas. De nuevo, la proyección de este punto da la solución PAV, que en este caso produce una ganancia significativa en la energía de condensación ( $e_{\text{PAV}}^{\text{cond}} = -0.7d$ ), como se puede apreciar claramente en las figuras 5.2(a)-5.3(b). Sin embargo, la curva proyectada (PCBCS) presenta a su vez otro mínimo más profundo desplazado a valores mayores de las fluctuaciones en el número de partículas ( $\Delta N^2 = 3.4, e_{RVAP_1}^{\text{cond}} = -0.9d$ ).

Además, en la figura 5.3 se ha incluido la energía proyectada aproximada a segundo orden en el desarrollo de Kamlah (ec. 5.50) y la solución de

LN. Vemos que, por un lado, tanto en la región normal-conductora como en la superconductora, la energía proyectada aproximada solapa prácticamente con la proyección exacta (PCBCS) indicando que la expansión de Kamlah en este caso da buenos resultados. Por otro lado, la energía de LN prácticamente coincide con el mínimo de la superficie proyectada aproximada y con la solución RVAP<sub>1</sub>. Teniendo en cuenta las conclusiones descritas en la sección (sec. 5.2.5) podemos inferir que el parámetro  $h_2$  se mantendrá prácticamente constante en función de  $\Delta N^2$ . En otras palabras, en este modelo se cumplen las dos condiciones para que el método de LN produzca resultados razonables. Además, la proyección de la solución de LN, la aproximación PLN corresponde con el punto de la superficie PCBCS con el valor de  $\Delta N^2$  de la aproximación LN. Debido a la proximidad entre las soluciones RVAP<sub>1</sub> y LN, la aproximación PLN coincide prácticamente con la RVAP<sub>1</sub>.

Si realizamos el análisis anterior en todo el rango de valores de  $\chi$  obtenemos los resultados de la figura 5.2(a) para las aproximaciones RVAP<sub>1</sub> y LN (el resultado para el PLN coincide prácticamente con el RVAP<sub>1</sub> y no se muestra). Aquí se observan las mejoras evidentes que dan estos métodos con respecto a la aproximación de campo medio y PAV. Por un lado, la transición de fase desaparece obteniéndose soluciones superconductoras incluso para valores pequeños de la interacción. Además vemos que estos métodos se aproximan más a la solución VAP representada por la línea continua en la figura 5.2(a) y por las líneas horizontales discontinuas en las figuras 5.3(a)-(b). No obstante, se observa que esta última queda todavía lejos de ser alcanzada explorando la energía proyectada (exacta o aproximada) únicamente en función de las fluctuaciones en el número de partículas. Esto se puede ver claramente en la figura 5.2(b) donde se representan las diferencias relativas entre la energía de condensación VAP y las distintas aproximaciones. Aquí se puede apreciar que las desviaciones con respecto a la aproximación VAP son especialmente significativas en el régimen de apareamiento débil, haciéndose menores a medida que aumenta la intensidad de la interacción.

El paso siguiente en la búsqueda de una aproximación más cercana a la solución VAP será, aprovechando la flexibilidad de los métodos RVAP, extender el estudio al siguiente momento relevante  $\Delta N^4$ . En la figura 5.4 se representan las superficies de energía CBCS y PCBCS como función de  $\Delta N^4$  para los mismos valores de  $\chi$  que en la figura 5.3. Además, el valor de  $\Delta N^2$  está fijado en los respectivos mínimos de las curvas proyectadas PCBCS de la figura 5.3. De nuevo se observa un desplazamiento entre el mínimo de la curva de campo medio CBCS, cuya proyección da la solución RVAP<sub>1</sub>, y el mínimo de la curva proyectada PCBCS, tanto en la región normal-conductora como

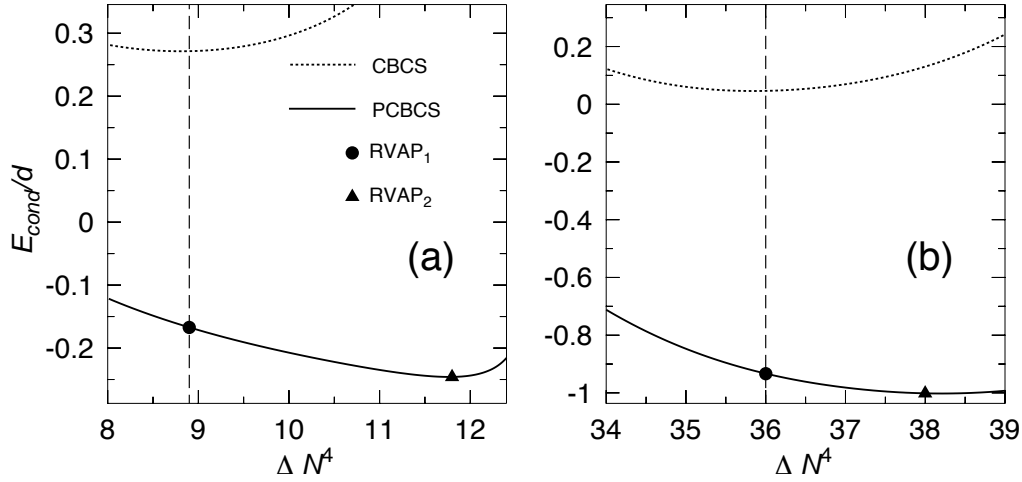


Figura 5.4: Superficies de energía en la aproximación de campo medio (CBCS, línea de puntos) y proyectada (PCBCS, línea continua) como función de  $\Delta N^4$  para  $\chi=1.1$  y  $\Delta N^2=1.6$  (a) y  $\chi=1.9$  y  $\Delta N^2=3.4$  (b). Las líneas verticales indican el valor del mínimo de las curvas CBCS cuya proyección dan las soluciones RVAP<sub>1</sub> (círculos). Los mínimos de las curvas PCBCS son las soluciones RVAP<sub>2</sub> (triángulos)

en la superconductora.

A continuación se realiza el mismo procedimiento para distintos valores de  $\Delta N^2$  y se van seleccionando los mínimos correspondientes a las curvas proyectadas PCBCS en la dirección  $\Delta N^4$ . En la figura 5.5 se representan dichos mínimos en función de  $\Delta N^2$  junto con la curva PCBCS calculada explorando sólo las fluctuaciones en el número de partículas. El mínimo de ésta última es la solución RVAP<sub>1</sub> mientras que el mínimo de la primera es la solución RVAP<sub>2</sub>. En esta curva podemos apreciar claramente la mejora sustancial que supone la aproximación RVAP<sub>2</sub> ya que prácticamente se obtiene el valor de la solución VAP, marcado con líneas discontinuas en la figura, tanto en el régimen normal-conductor como en el superconductor. Este hecho se muestra claramente en la figura 5.2(a) donde el resultado RVAP<sub>2</sub> está prácticamente sobre la curva VAP. Además, la desviación relativa (fig. 5.2(b)) es mucho menor que en el resto de aproximaciones estudiadas y sólo se observan ligeras diferencias en el límite de apareamiento pequeño.

A partir de estos resultados podemos concluir que, en este modelo ( $\mathcal{H}_1$ ), las aproximaciones RVAP<sub>1</sub> y PLN dan casi idénticos resultados, pero que

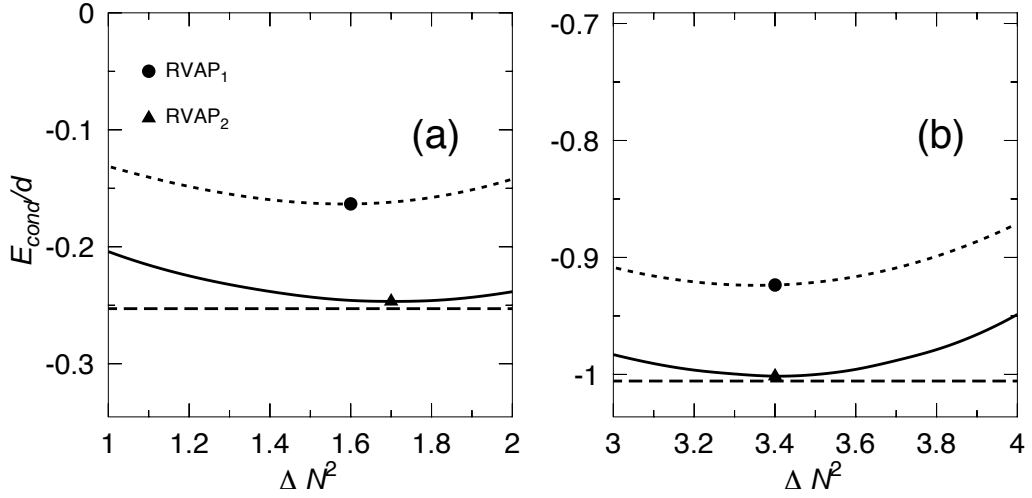


Figura 5.5: Superficies de energía proyectadas como función de  $\Delta N^2$  para  $\chi=1.1$  (a) y  $\chi=1.9$  (b). La línea de puntos se corresponde con la PCBCS de la figura 5.3 cuyo mínimo es la solución RVAP<sub>1</sub> (circulo) mientras que la línea continua se halla seleccionando los mínimos en la dirección  $\Delta N^4$  para valores fijos de  $\Delta N^2$ . El mínimo de esta curva es la aproximación RVAP<sub>2</sub> (triángulos). La solución VAP se representa por la línea horizontal discontinua.

es necesario ir más allá, explorando el grado de libertad  $\Delta N^4$ , para obtener prácticamente la solución VAP. Además, en este modelo la calidad de esta última se puede comparar directamente con la energía exacta dada por la resolución de las ecuaciones de Richardson [3, 32, 37]. En la figura 5.6 se muestran las soluciones exacta y VAP en función de  $\chi$  [38]. Vemos que prácticamente coinciden en todo el rango de valores de la intensidad de la interacción y sólo para valores grandes de  $\chi$  se obtienen pequeñas desviaciones. Sin embargo, este acuerdo no sucede en el caso general, ya que para distinto número de partículas y/o distintas intensidades de la interacción, la aproximación VAP por sí misma no es capaz de describir la suave transición entre un régimen de apareamiento débil a otro con apareamiento fuerte [39, 31, 32].

Por último, repetimos el estudio efectuado previamente con el hamiltoniano ( $\mathcal{H}_1$ ) ahora con el hamiltoniano de dos niveles degenerados en la aproximación de semi-llenado ( $\mathcal{H}_2$ ) [33, 34, 35]. En este modelo la solución VAP y la RVAP<sub>1</sub> coinciden exactamente ya que la energía proyectada sólo depende de un parámetro variacional [33] que se puede asociar a las fluctuaciones  $\Delta N^2$ . Sin embargo, El objeto de este estudio es explorar la validez de las aproximaciones LN y PLN en relación con el método RVAP<sub>1</sub>.

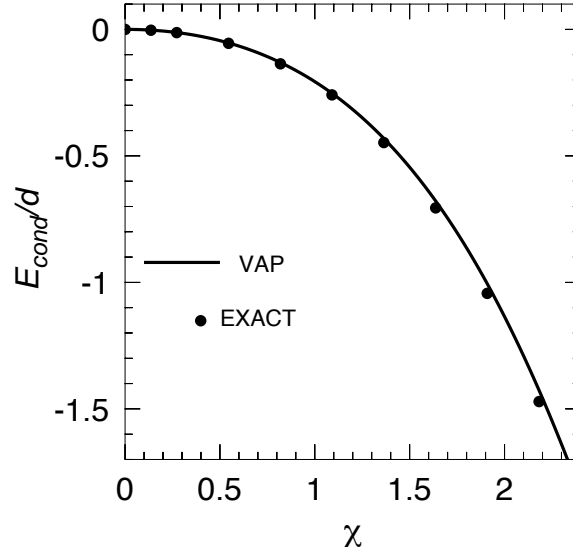


Figura 5.6: Energía de condensación (en unidades de  $d$ ) como función de la intensidad de la interacción de apareamiento (en términos del parámetro  $\chi = G(N_0 - 1)/(2d)$ ) para la aproximación VAP (línea continua) y resultado exacto (puntos)

En la figura 5.7 representamos la energía de condensación para el modelo ( $\mathcal{H}_2$ ) en función de la intensidad de la interacción para las distintas aproximaciones de manera equivalente a la figura 5.2 para el modelo ( $\mathcal{H}_1$ ). En la figura 5.7(a) observamos que, efectivamente, la solución VAP y RVAP<sub>1</sub> coinciden. Sin embargo, contrariamente a lo que ocurría en el caso con muchos niveles, se aprecian diferencias notables entre la solución de LN y la aproximación RVAP<sub>1</sub>.

Para entender este comportamiento representamos en la figura 5.8 las superficies de energía a nivel de campo medio (CBCS) y proyectada exactamente (PCBCS) y en la aproximación de Kamlah a segundo orden como función de  $\Delta N^2$ . En primer lugar observamos que la expansión de Kamlah en este caso no es capaz de reproducir la energía proyectada exacta del sistema, al contrario de lo que se apreciaba en la figura 5.3. Además, la solución de LN no está en el mínimo de dicha curva evidenciando que existe una fuerte dependencia del parámetro  $h_2$  con  $\Delta N^2$ . No obstante, la solución proyectada PLN está muy cerca de la aproximación RVAP<sub>1</sub>, no sólo en este caso sino también en todo el rango de  $\chi$  como se ve en la figura 5.7(a)-(b). Solamente

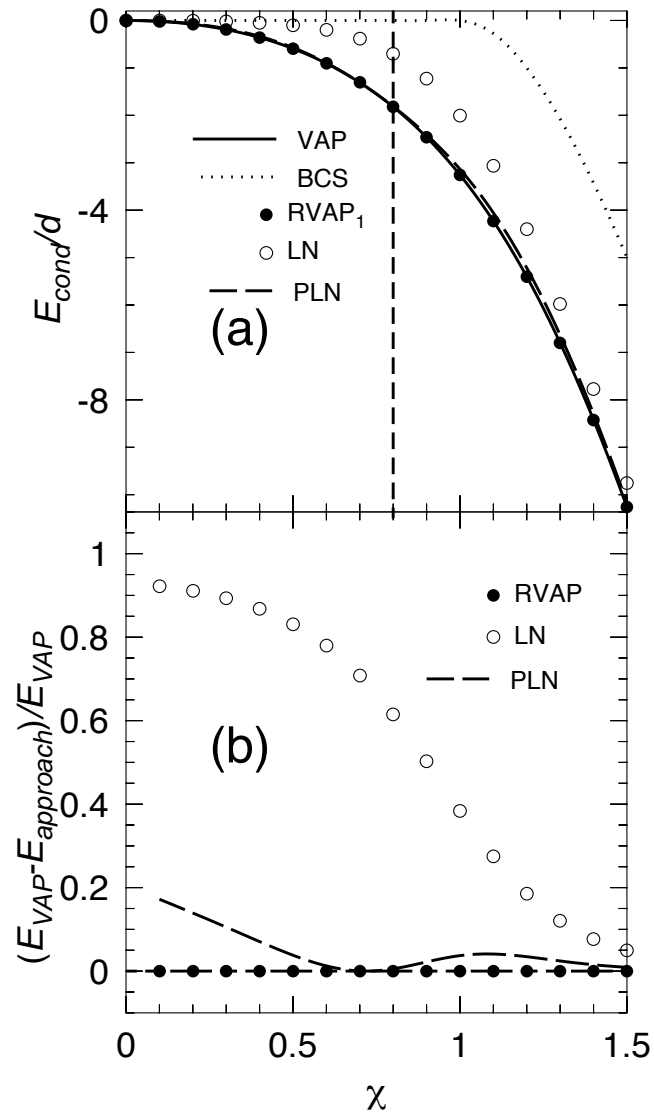


Figura 5.7: Equivalente a la figura 5.2 pero con el hamiltoniano de dos niveles.



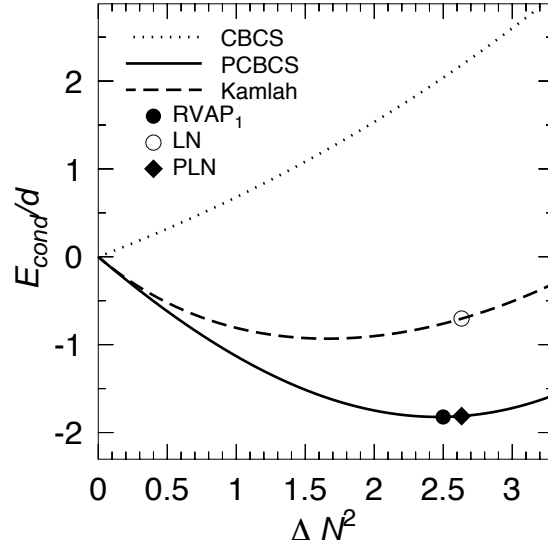


Figura 5.8: Superficies de energía como función de las fluctuaciones en el número de partículas para las aproximaciones BCS (línea de puntos, CBCS) y su proyección a buen número de partículas (línea continua, PCBCS) y para un valor de  $\chi = 0.8$ . El mínimo de la curva proyectada es la solución  $\text{RVAP}_1 = \text{VAP}$  (círculo negro). Además, se representa la energía proyectada aproximada a segundo orden en la expansión de Kamlah (línea discontinua) que contiene a la solución de Lipkin-Nogami autoconsistente (círculo blanco, LN). La proyección de este punto da la energía en la aproximación PLN (diamante).

en el caso de tener una intensidad de la interacción de apareamiento pequeña se observan desviaciones apreciables entre las soluciones  $\text{RVAP}_1$  y PLN.

En la figura 5.9 se representan el parámetro  $h_2$  (ec. 5.40) y el multiplicador de Lagrange  $\lambda_{\Delta N^2}$  del método  $\text{RVAP}_1$  (ec. 5.45) en función de  $\Delta N^2$  para los dos modelos de hamiltoniano de apareamiento estudiados. El corte entre las dos curvas se corresponde con la solución de LN (ec. 5.48). En esta figura se observa porqué la solución de LN en el modelo  $\mathcal{H}_1$  está tan próxima al mínimo de la superficie de energía definida por la expansión de Kamlah (figura 5.3) y tan alejada del mínimo en el modelo  $\mathcal{H}_2$  (figura 5.8). Esto se debe a que en el primer caso (figura 5.9(a)) el parámetro  $h_2$  es prácticamente constante en los alrededores de la solución de LN mientras que en el segundo caso presenta una fuerte dependencia con  $\Delta N^2$ .

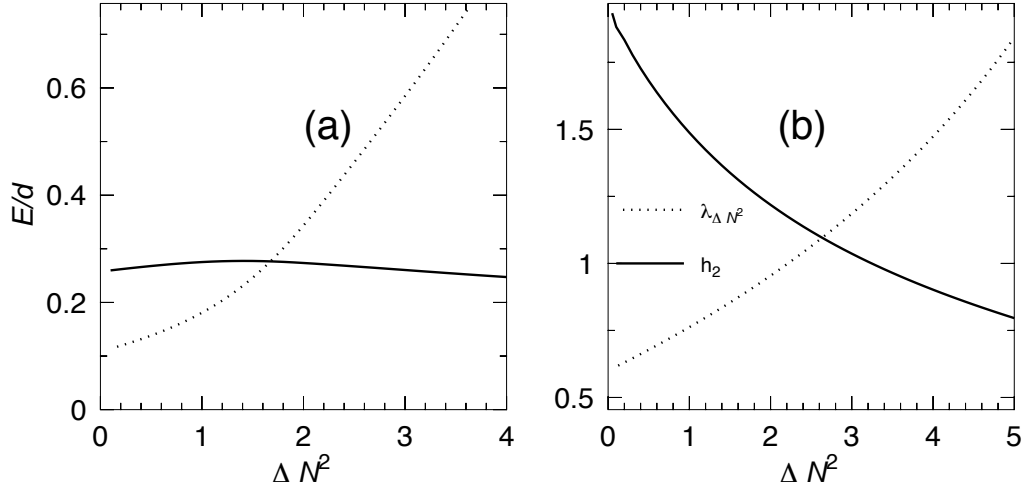


Figura 5.9: Valores del parámetro  $h_2$  del método de LN (ec. 5.40) y del multiplicador de Lagrange  $\lambda_{\Delta N^2}$  del método RVAP<sub>1</sub> (ec. 5.45) en función de  $\Delta N^2$  para (a) el modelo de múltiples niveles  $\mathcal{H}_1$  con  $\chi = 1.1$  y (b) el modelo de dos niveles  $\mathcal{H}_2$  con  $\chi = 0.8$

### 5.3.2. Correlaciones de apareamiento con la interacción de Gogny

Para finalizar el estudio de las correlaciones de apareamiento en el marco de la restauración del número de partículas aplicamos los métodos anteriores con un hamiltoniano realista. En la figura 5.10(a) se muestran las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas calculadas con la interacción de Gogny D1S [40] para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . También se muestra la solución de campo medio (HFB) para apreciar la ganancia de energía que se obtiene al restaurar la simetría. Los cálculos se han realizado con un espacio de configuración de once capas de oscilador y la longitud de oscilador se ha optimizado a nivel de campo medio.

En este caso vemos de nuevo que la solución VAP es la que da una energía más baja, mientras que la solución de campo medio (HFB) y su proyección PAV está siempre por encima con respecto a las demás aproximaciones. Entre las dos se encuentran las soluciones PLN y RVAP<sub>1</sub>, que, como en los casos que estudiamos anteriormente, prácticamente coinciden. Solamente se aprecian ligeras diferencias entre ellas cerca de  $q_{20} = 0$  (b).

Además, en la figura 5.10(b) se muestran las normas proyectadas a buen

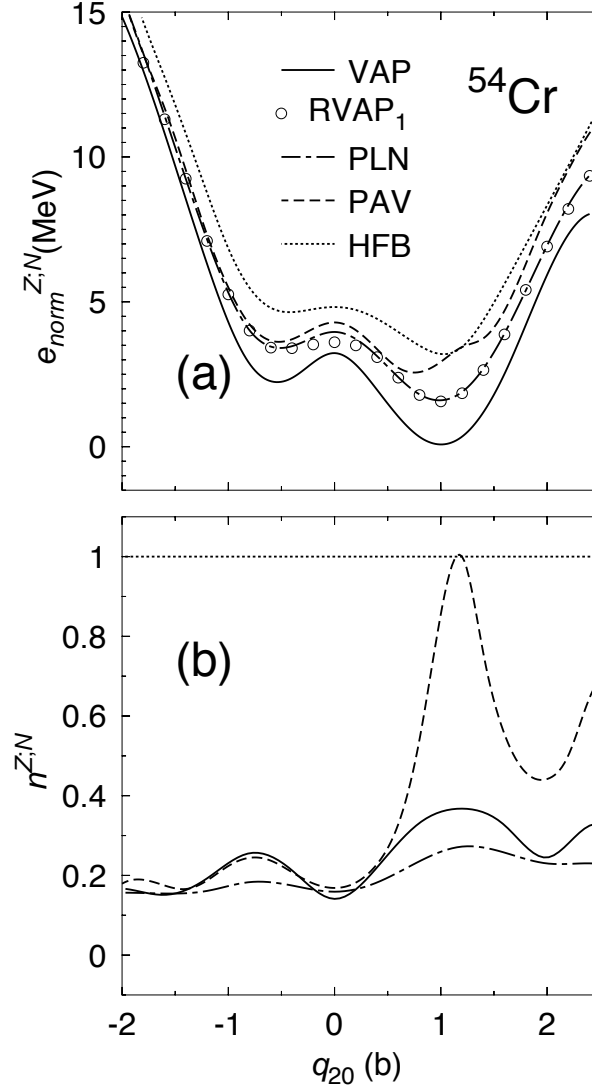


Figura 5.10: (a) Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$  calculadas con distintas aproximaciones: VAP (línea continua),  $\text{RVAP}_1$  (círculos), PLN (líneas y puntos) y PAV (línea discontinua) para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Además, se muestra la superficie sin proyectar correspondiente a la solución HFB (línea de puntos). El cero de energía se corresponde con el mínimo en la aproximación VAP. (b) Normas proyectadas de los estados intrínsecos para las distintas funciones de onda intrínsecas. Además se muestra la norma sin proyectar que en todos los casos vale uno (línea de puntos).

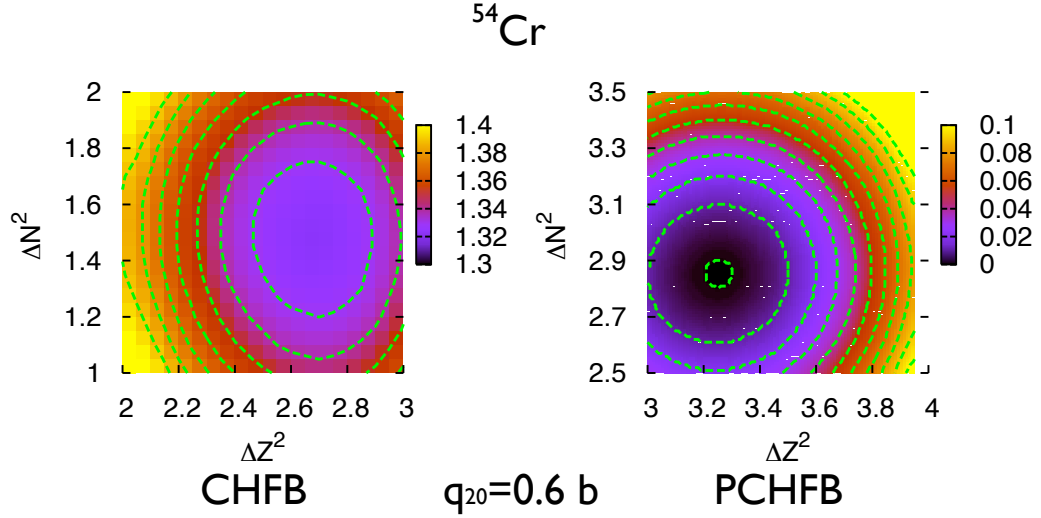


Figura 5.11: Superficies de energía potencial en función de  $(\Delta N^2, \Delta Z^2)$  (a) en la aproximación de HFB (CHFB) y (b) proyectada a buen número de partículas (PCHFB). El cero de energía en los dos casos está normalizado al valor del mínimo de la superficie proyectada (solución RVAP<sub>1</sub>). Los contornos indican diferencias de 0.01 MeV. El valor de  $q_{20}$  es 0.6 (b).

número de partículas (ec. 5.13) en las distintas aproximaciones. Esta cantidad es la probabilidad de construir un autoestado del número de partículas con unos  $(N, Z)$  concretos (en este caso  $N = 30, Z = 24$ ) a partir del estado intrínseco  $|\Phi(q_{20})\rangle$  (que está normalizado a la unidad como se muestra en la línea de puntos de la figura). Esta norma sigue un comportamiento oscilante que tiene que ver con la estructura de capas subyacente, como se verá más adelante. Es interesante comentar que para  $q_{20} = 1.20$  (b) la aproximación de campo medio es autoestado simultáneamente de los operadores  $\hat{N}, \hat{Z}$  (la norma proyectada es igual a uno) y que, por tanto, no se obtiene ninguna energía por restaurar la simetría del número de partículas en ese punto, como se aprecia en la figura 5.10(a). La aproximación RVAP<sub>1</sub> se obtiene a partir de los mínimos de las superficies de energía potencial proyectadas definidas a lo largo del plano  $(\Delta N^2, \Delta Z^2)$ . En la figura 5.11 se ve un ejemplo de cómo funciona el método en este caso. Fijando un valor de la deformación  $q_{20} = 0.6$  (b) se construye la superficie de energía potencial a nivel de campo medio (HFB). En la figura 5.11(a) se observa que se obtiene un mínimo de la superficie (CHFB) en un valor de  $(\Delta N^2, \Delta Z^2) \approx (1.5, 2.7)$ . Proyectando toda la superficie (PCHFB) vemos que el mínimo se desplaza a valores más altos de  $(\Delta N^2, \Delta Z^2) \approx (2.8, 3.3)$  (figura 5.11(b)) de manera equivalente a lo

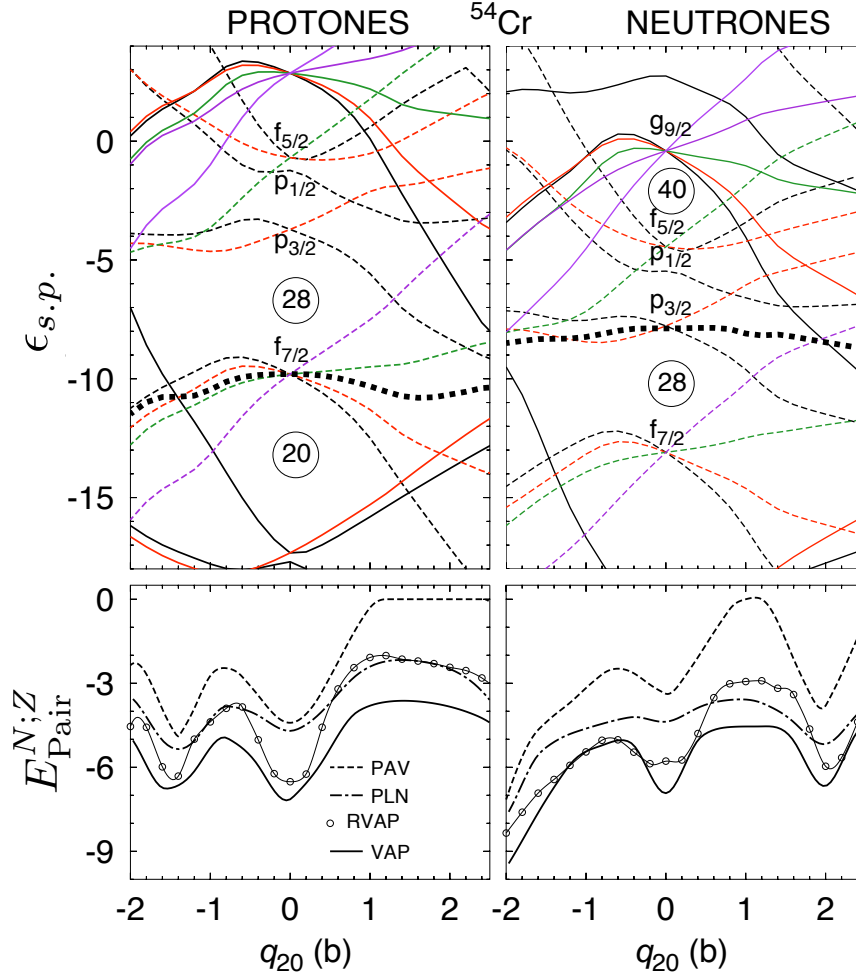


Figura 5.12: Energías de partícula independiente del núcleo  $^{54}\text{Cr}$  ((a) protones, (b) neutrones). Las líneas continuas indican estados de paridad positiva mientras que las discontinuas representan estados de paridad negativa. Energías de apareamiento proyectadas ((c) protones, (d) neutrones) en las distintas aproximaciones: VAP (línea continua),  $\text{RVAP}_1$  (círculos), PLN (líneas y puntos) y PAV (línea discontinua). El nivel de Fermi está representado por las líneas discontinuas gruesas ((a) y (b))

que veíamos en la figura 5.3 en un caso más sencillo.

Es importante reseñar que la figura 5.10 muestra claramente que las soluciones  $RVAP_1$  y  $PLN$  se aproximan mejor o peor a la solución  $VAP$  dependiendo de la deformación cuadrupolar. Esto se debe a que en un núcleo la intensidad de la interacción de apareamiento depende muy fuertemente de la densidad de niveles de partícula independiente alrededor del nivel de Fermi. En los paneles (a) y (b) de la figura 5.12 se muestran las energías de partícula independiente calculadas a nivel de campo medio para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Si seguimos el nivel de Fermi (representado con una línea de puntos gruesa) vemos que, tanto en los protones como en los neutrones, en el lado oblado se tiene una densidad de niveles relativamente alta (apareamiento fuerte) mientras que en el lado prolado ocurre lo contrario en algunas regiones (apareamiento débil). En los paneles (c) y (d) representamos la energía de apareamiento de protones y neutrones (ec. 5.32) en las distintas aproximaciones. Aquí se puede apreciar que la solución  $PAV$  presenta transiciones de fase espurias alrededor de  $1.2b \leq q_{20} \leq 2.40$  (b) en los protones y  $q_{20} \approx 1.0$  (b) en los neutrones debidas a que los niveles de Fermi se encuentran en mitad de un *gap* en el espectro de partícula independiente. Al igual que vimos en los modelos sencillos, las aproximaciones  $PLN$ ,  $RVAP_1$  y  $VAP$  no presentan tales transiciones de fase patológicas. En estos casos la energía de apareamiento sigue un comportamiento oscilatorio, presentando mínimos en las deformaciones donde se producen cruces de niveles de partícula independiente ( $q_{20} \approx -1.5$  (b) para los protones,  $q_{20} \approx 2$  (b) para los neutrones y  $q_{20}=0$  (b) para ambos canales de isospín). Sin embargo, vemos que en estos cruces de niveles la aproximación  $PLN$  no es capaz de obtener las correlaciones de apareamiento adecuadas y se aleja de la solución  $VAP$  al igual que ocurre en los límites de apareamiento pequeño. Esto se soluciona parcialmente con la aproximación  $RVAP_1$ . Por último, conviene reseñar que en algunos puntos de las figuras (figs. 5.10(c)-(d)) la energía de apareamiento de una solución variacionalmente más restringida está por debajo de la energía de apareamiento del  $VAP$  o  $RVAP_1$ . Sin embargo, es la energía total del sistema la que se minimiza y, como se aprecia en la figura (fig. 5.11), siempre se obtienen energías totales más bajas con los métodos cuyos espacios variacionales son mayores.

## 5.4. Resumen

En este capítulo hemos descrito las principales características del método de la proyección a buen número de partículas. En particular, hemos estudiado la calidad de las soluciones dependiendo del método variacional con la que se

hallan las funciones de onda intrínsecas de tipo producto. Además, del estudio de las distintas aproximaciones hechas en la resolución de los hamiltonianos de apareamiento reducido podemos extraer las siguientes conclusiones:

1. Se ha mostrado explícitamente que la solución proyectada a buen número de partículas completamente variacional (VAP) se puede aproximar de manera sistemática utilizando métodos RVAP, consistentes en minimizar la energía proyectada en espacios variacionales reducidos definidos a lo largo de los grados de libertad más relevantes del sistema.
2. El método de Lipkin-Nogami proyectado (PLN) es una aproximación al método  $\text{RVAP}_1$  con lo que sólo es capaz de incluir adecuadamente las correlaciones de apareamiento que incluye el VAP cuando las fluctuaciones en el número de partículas  $\Delta N^2$  sea el único grado de libertad importante.
3. Los métodos VAP y RVAP (y su aproximación, PLN) no presentan las transiciones de fase (normal-conductor a superconductor) que aparecen a nivel de campo medio (y su extensión PAV). Éstas se deben a que no se pueden obtener funciones de onda de tipo producto con la simetría rota hasta que no se alcanza un valor umbral de la intensidad de la interacción de apareamiento.
4. Se han comprobado numéricamente la condiciones que justifican variacionalmente el método de LN (sec. 5.2.5).
5. En el modelo con distintos niveles doblemente degenerados se ha comprobado que tanto el método  $\text{RVAP}_1$  como el método PLN son incapaces de dar una buena aproximación a la solución VAP en el límite de apareamiento débil y que se tiene que ir más allá del grado de libertad  $\Delta N^2$  en dicho límite.

Además de estas conclusiones se debe añadir lo siguiente en relación a la restauración del número de partículas con un hamiltoniano realista (Gogny). Dado que en un núcleo la intensidad de la interacción de apareamiento está determinada por la estructura de niveles de partícula independiente (Nilsson) alrededor de la energía de Fermi, se ha demostrado que las distintas aproximaciones a la solución VAP dependen fuertemente de la deformación. En particular, la aproximación PLN no es muy adecuada ni en las regiones de apareamiento débil ni tampoco en las deformaciones donde se produzca un cruce de niveles cerca de la energía de Fermi.

## Referencias

- [1] J. Dukelsky, C. Echebbag, P. Schuck, Phys. Rev. Lett. 87, 066403 (2001)
- [2] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [3] R. W. Richardson, Phys. Rev 41, 949 (1966)
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
- [5] A. Bohr, B. R. Mottelson, D. Pines, Phys. Rev. 110, 936 (1958)
- [6] S. T. Belyaev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 31 (1959)
- [7] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 696, 467 (2001)
- [8] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)
- [9] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 74, 064309 (2006)
- [10] M. Anguiano, Tesis Doctoral, Universidad Autónoma de Madrid (sin publicar)
- [11] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, Phys. Rev. Lett. 99, 062501 (2007)
- [12] K. Dietrich, H. J. Mang, J. H. Pradal, Phys. Rev. 135, B22 (1964)
- [13] V. N. Fomenko, J. Phys. (G.B.) A 3, 8 (1970)
- [14] N. Onishi, S. Yoshida, Nucl. Phys. 80, 367 (1966).
- [15] R. Balian, E. Brezin, Nuovo Cimento 64, 37 (1969)
- [16] K. Hara, S. Iwasaki, Nucl. Phys. A 332, 61 (1979)
- [17] A. Valor, J. L. Egido, L. M. Robledo, Phys. Lett. B 392, 249 (1997)
- [18] A. Valor, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys A 665, 46 (2000)
- [19] R. Rodríguez Guzmán, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. 709, 201 (2002)
- [20] T. Duguet, P. Bonche, Phys. Rev. C 67, 054308 (2003)



## Referencias

---

- [21] M. Bender, T. Duguet, *Int. J. Mod. Phys. E* 16, 222 (2007)
- [22] H. J. Lipkin, *Ann. Phys. (N.Y.)* 9, 272 (1960)
- [23] Y. Nogami, *Phys. Rev.* 134, B313 (1964)
- [24] H. C. Pradhan, Y. Nogami and J. Law, *Nucl. Phys. A* 201, 357 (1973)
- [25] A. Kamlah, *Z. Phys.* 216, 52 (1968)
- [26] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo, *Phys. Lett. B* 545, 62 (2002)
- [27] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, L. M. Robledo, *Phys. Rev. C* 72, 064303 (2005)
- [28] N. D. Dang, *Phys. Rev. C* 71, 024302 (2005).
- [29] B. Jankó, A. Smith, V. Ambegaokar, *Phys. Rev. B* 50, 1152 (1994)
- [30] F. Braun, J. von Delft, *Phys. Rev. Lett.* 81, 4712 (1998)
- [31] J. Dukelsky, G. Sierra *Phys. Rev. Lett.* 83, 172 (1999)
- [32] M. A. Fernández, J. L. Egido *Phys. Rev. B* 68, 184505 (2003)
- [33] D. C. Zheng, D. W. L. Sprung and H. Flocard, *Phys. Rev. C* 46, 1355 (1992)
- [34] J. Dobaczewski and W. Nazarewicz, *Phys. Rev. C* 47, 2418 (1993)
- [35] K. Hagino and G. F. Bertsch, *Nucl. Phys. A* 679, 163 (2000)
- [36] J. L. Egido, J. Lessing, V. Martin and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* 594, 70 (1995)
- [37] S. Rombouts, D. Van Neck, J. Dukelsky *Phys. Rev. C* 69, 061303(R) (2004)
- [38] M. A. Fernández, Comunicación privada.
- [39] F. Braun and J. von Delft, *Proc. of the NATO ASI "Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics"*, Ankara/Antalya, Turkey, June 1999, Eds. I.O. Kulik and R. Ellialtıoglu, Kluwer Ac. Publishers, Dordrecht, 2000, p. 361. (cond-mat/9911058) (1999)
- [40] J. F. Berger, M. Girod, D. Gogny, *Com. Phys. Comm.* 63, 365 (1991)



## Capítulo 6

# Restauración de la simetría rotacional y el método de la coordenada generadora

Una de las aportaciones más importantes que se ha realizado en este trabajo de tesis es la implementación con la interacción de Gogny del método de la coordenada generadora (GCM) usando funciones de onda proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular [1]. En este sentido se puede considerar como una extensión de los trabajos previos realizados con la interacción de Gogny, en los que no se incluía la proyección a buen número de partículas [2, 3, 4, 5]. Un método similar al que aquí se presenta se ha implementado con interacciones de Skyrme y relativistas aunque en dichos casos se usa el método de LN para hallar las funciones intrínsecas de tipo producto que posteriormente se proyectan [6, 7]. En cambio, en este trabajo se usarán también las funciones de onda VAP descritas en el capítulo anterior con lo que, en este sentido, se mejoran de igual manera estas aproximaciones al incluirse las correlaciones de apareamiento con un método más adecuado.

En este capítulo se va a exponer, en primer lugar, el método de proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular (sec. 6.1). Posteriormente se describirá el método GCM que se ha usado aquí, haciendo especial énfasis en la convergencia del método y la importancia de la elección de las funciones de onda intrínsecas para obtener buenos resultados (sec. 6.2).

## 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

La ruptura espontánea de las simetrías espaciales permite estudiar a nivel de campo medio fenómenos colectivos tan importantes como las rotaciones o las deformaciones. Sin embargo, como se vio en los capítulos precedentes, la transformación de HFB hace que la función de onda resultante no preserve las simetrías del hamiltoniano, en particular, la invariancia bajo rotaciones. Esta simetría permite etiquetar los estados del núcleo por el valor de su momento angular. Por lo tanto, resulta básico restaurar la simetría rotacional para obtener una correcta descripción de la estructura nuclear.

### 6.1.1. Proyección a buen momento angular

De nuevo se puede hacer uso del método general de la proyección (sec. 4.2.2) para conseguir autoestados del momento angular total  $\hat{J}^2$  y tercera componente  $\hat{J}_z$ . En este caso el operador que proyecta las funciones de onda sobre el subespacio de estados con el momento angular y la tercera componente bien definidos se puede expresar como [8, 9]:

$$P^{JM} = \sum_K a_K^J P_{MK}^J \rightarrow P_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega \quad (6.1)$$

donde  $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$  son los ángulos de Euler,  $\mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega)$  las funciones de Wigner y  $\hat{R}(\Omega)$  el operador de rotaciones [10]:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_y} e^{-i\gamma\hat{J}_z} \quad (6.2)$$

$$\hat{R}(\Omega)|JM\rangle = \sum_{M'} \mathcal{D}_{M'M}^J(\Omega)|JM'\rangle \quad (6.3)$$

$$\hat{R}(\Omega) = \sum_{ij} R_{ij}(\Omega) c_i^\dagger c_j \quad (6.4)$$

A continuación demostraremos que aplicando el operador definido anteriormente (ec. 6.1) sobre una función de onda  $|\Phi\rangle$  se obtiene un autoestado de los operadores  $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ . Para ello desarrollamos  $|\Phi\rangle$  en la base de autoestados de dichos operadores:

$$|\Phi\rangle = \sum_{J'M'} b_{J'M'} |\delta J'M'\rangle \quad (6.5)$$

### 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

siendo  $\delta$  el conjunto de números cuánticos correspondientes a otros operadores que conmuten con  $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ .

Ahora aplicamos  $P^{JM}$  (ec. 6.1) en ambos miembros de la ecuación:

$$\begin{aligned} P^{JM}|\Phi\rangle &= \sum_{KJ'M'} a_K^J b_{J'M'} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) |J'M'\rangle = \\ &= \sum_{KJ'M'M''} a_K^J b_{J'M'} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \mathcal{D}_{M''M'}^{J'}(\Omega) |J'M''\rangle \end{aligned}$$

Por último utilizamos la propiedad de las matrices de Wigner:

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{M_1M'_1}^{J_1*}(\Omega) \mathcal{D}_{M_2M'_2}^{J_2}(\Omega) = \frac{8\pi^2}{2J_1+1} \delta_{J_1J_2} \delta_{M_1M_2} \delta_{M'_1M'_2} \quad (6.6)$$

con lo que finalmente se obtiene lo que se quería demostrar:

$$P^{JM}|\Phi\rangle = \left( \sum_K a_K^J b_{JK} \right) |JM\rangle \quad (6.7)$$

Observando el resultado anterior se puede deducir una manera útil de expresar el operador  $P_{MK}^J$  en notación de Dirac:

$$P_{MK}^J = |JM\rangle \langle JK| \quad (6.8)$$

Con ello se pueden demostrar fácilmente las siguientes propiedades:

$$(P_{MK}^J)^\dagger = P_{KM}^J \quad ; \quad P_{M_1K_1}^{J_1} P_{M_2K_2}^{J_2} = \delta_{J_1J_2} \delta_{K_1M_2} P_{M_1K_2}^{J_1} \quad (6.9)$$

La función de onda construida a partir de la proyección a buen momento angular de una función de campo medio, en general, no es autoestado de los operadores número. Como se analizará más adelante, ni siquiera tendrá el valor del número de partículas correcto en promedio ya que esta condición se impone normalmente en los estados producto. Por razones computacionales, este problema se corregía de manera aproximada en las primeras implementaciones de la proyección a buen momento angular [2, 3, 4, 5]. Sin embargo, resulta más adecuado construir, a partir de estados del tipo HFB, funciones de onda que sean autoestados tanto del momento angular como del número de partículas:

$$|\Phi^{NZ;JM}(\vec{q})\rangle = P^{JM}|\Phi^{NZ}(\vec{q})\rangle = P^{JM}P^N P^Z|\Phi(\vec{q})\rangle \quad (6.10)$$

donde  $\{\vec{q}\}$  son de nuevo parámetros internos de la función de onda como deformaciones o fluctuaciones cuánticas.

Es habitual denominar el estado  $|\Phi(\vec{q})\rangle$  como un estado en el sistema de referencia intrínseco, definido por el campo medio, y al estado  $|\Phi^{NZ;JM}(\vec{q})\rangle$  como el estado correspondiente en el sistema de laboratorio. El segundo se produce a partir del primero mediante el siguiente mecanismo:

1. Se construyen  $2J + 1$  estados con buen momento angular total  $J$  mediante la combinación lineal de todas las posibles rotaciones del estado intrínseco. Los coeficientes de esta combinación son las funciones de Wigner.
2. El estado final se construye mediante la combinación lineal de esos  $2J + 1$  estados, es decir, mediante la combinación lineal de todas las posibles proyecciones del momento angular total  $J$  sobre el eje  $z$  del sistema intrínseco.

### 6.1.2. Energía proyectada

Al igual que hacíamos en el capítulo anterior, vamos a calcular el valor esperado del hamiltoniano usando en este caso las funciones de onda definidas por la expresión (ec. 6.10):

$$\begin{aligned} E^{J;NZ}(\vec{q}) &= \frac{\langle \Phi^{NZ;JM}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZ;JM}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ;JM}(\vec{q}) | \Phi^{NZ;JM}(\vec{q}) \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} \end{aligned} \quad (6.11)$$

#### Norma

A continuación, utilizando las propiedades definidas más arriba (ec. 6.9) desarrollamos la norma:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}^{NZ;J}(\vec{q}) &\equiv \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle \\ &= \sum_{KK'} a_k^{J*} a_{k'}^J \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (6.12)$$

Por tanto, para calcular la norma se tiene que evaluar la siguiente expresión:

$$n^{NZ}(\vec{q}, \Omega) \equiv \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle = n^N(\vec{q}, \Omega) n^Z(\vec{q}, \Omega) \quad (6.13)$$

### 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

$$n^{N_\tau}(\vec{q}, \Omega) \equiv \frac{1}{L} \sum_{\varphi_{l_\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l_\tau} N_\tau} \langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle \quad (6.14)$$

donde se han usado las propiedades de los proyectores a buen número de partículas y que el operador de rotaciones conmuta con los operadores número. Además, se han desarrollado las expresiones para  $P^N$  y  $P^Z$  (ec. 5.11) y tenido en cuenta la factorización de la función de onda producto en los canales de isospín (ec. 5.15). Por último, el solape  $\langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle$  se puede calcular utilizando la fórmula de Onishi (véase el apéndice A, ec. A.25). Veremos más adelante que estas expresiones se simplifican considerablemente cuando se tienen en cuenta las simetrías autoconsistentes impuestas a las funciones de onda de tipo producto  $|\Phi(\vec{q})\rangle$ .

### Hamiltoniano

Ahora vamos a desarrollar el numerador de la ecuación de la energía proyectada (ec. 6.11). Para ello tenemos en cuenta que los términos independientes de la densidad del hamiltoniano conmutan con el operador de rotaciones con lo que se tiene que:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{NZ;J}(\vec{q}) &\equiv \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle = \\ &\sum_{KK'} a_k^{J*} a_{K'}^J \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (6.15)$$

Además, se puede demostrar que con la prescripción de la densidad espacial que se usa en este trabajo (sec. 6.1.3), el término dependiente de la densidad también se expresa igualmente como en la ecuación (ec. 6.15) [4].

El elemento de matriz  $h^{NZ}(\vec{q}, \Omega) \equiv \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle$  que aparece en la integral (ec. 6.15) se calcula de manera equivalente a la expresión (ec. 5.14), donde ahora aparece una dependencia con los ángulos de Euler:

$$e^{NZ}(\vec{q}, \Omega) \equiv \frac{h^{NZ}(\vec{q}, \Omega)}{n^{NZ}(\vec{q}, \Omega)} = e_{\text{Cin}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) + e_{\text{HF}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) + e_{\text{Pair}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) \quad (6.16)$$

con:

$$e_{\text{Cin}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) = \text{Tr} [t\rho^{P,10,Z}(\vec{q}, \Omega)] + \text{Tr} [t\rho^{P,10,N}(\vec{q}, \Omega)] \quad (6.17)$$

$$\begin{aligned}
 e_{\text{HF}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) = & \\
 & \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZZ}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) \right] y^Z(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) + \\
 & \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NZ}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) \rho^{P,10,N}(\vec{q}, \Omega) \right] y^Z(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) + \\
 & \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,NN}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \right] y^N(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) + \\
 & \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Gamma^{10,ZN}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \rho^{P,10,Z}(\vec{q}, \Omega) \right] y^N(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \quad (6.18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_{\text{Pair}}^{NZ}(\vec{q}, \Omega) = & \\
 & - \sum_{l_Z=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,Z}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) \right] y^Z(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_Z}) - \\
 & \sum_{l_N=1}^L \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \Delta^{10,N}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \right] y^N(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_N}) \quad (6.19)
 \end{aligned}$$

donde se han definido la matriz densidad y los tensores de apareamiento generalizados (ecs. A.32, A.33, A.34) así como los campos de Hartree-Fock y apareamiento (ecs. B.49,B.50).

$$\rho_{ll'}^{10,N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \left( e^{i\varphi_{l_{N_\tau}}} V^*(\vec{q}) R(\Omega) T_{22}^{-1} V^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (6.20)$$

$$\kappa_{ll'}^{10,N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \left( e^{i\varphi_{l_{N_\tau}}} V^* R(\Omega)(\vec{q}) T_{22}^{-1} U^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (6.21)$$

$$\kappa_{ll'}^{01,N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = - \left( e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}}} U^*(\vec{q}) R^*(\Omega) T_{22}^{-1} V^T(\vec{q}) \right)_{ll'} \quad (6.22)$$

$$\Gamma_{ll'}^{10,N_\tau,N_{\tau'}}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \sum_{kk'} \bar{v}_{lkl'k'} \rho_{k'k}^{10,N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) \quad (6.23)$$



### 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

$$\Delta_{ll'}^{10, N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \bar{v}_{ll'kk'} \kappa_{kk'}^{10, N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) \quad (6.24)$$

Además, se ha definido la matriz densidad proyectada como:

$$\rho_{ll'}^{P, 10, N_\tau}(\vec{q}, \Omega) \equiv \frac{1}{L n^{N_\tau}(\vec{q})} \sum_{l_z=1}^L e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} \rho_{ll'}^{10, N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) n^{N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) \quad (6.25)$$

Por último, se han definido las siguientes cantidades (ec. A.15):

$$T_{22}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = V^T(\vec{q}) e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} R(\Omega) V^*(\vec{q}) + U^T(\vec{q}) e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} R^*(\Omega) U^*(\vec{q}) \quad (6.26)$$

$$y^{N_\tau}(\vec{q}, \Omega, \varphi_{l_{N_\tau}}) = \frac{e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} \langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle}{\sum_{l_{N_\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} \langle \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(\vec{q}) \rangle} \quad (6.27)$$

Como resumen diremos que la energía proyectada simultáneamente a buen número de partículas y momento angular tiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} E^{J; NZ}(\vec{q}) &= \frac{\mathcal{H}^{NZ; J}(\vec{q})}{\mathcal{N}^{NZ; J}(\vec{q})} \\ &= \frac{\sum_{KK'} a_K^{J*} a_{K'}^J \int d\Omega \mathcal{D}_{KK'}^{J*}(\Omega) e^{NZ}(\vec{q}, \Omega) n^{NZ}(\vec{q}, \Omega)}{\sum_{KK'} a_K^{J*} a_{K'}^J \int d\Omega \mathcal{D}_{KK'}^{J*}(\Omega) n^{NZ}(\vec{q}, \Omega)} \end{aligned} \quad (6.28)$$

#### 6.1.3. Término dependiente de la densidad

Como se comentó en el capítulo anterior, la densidad espacial que aparece explícitamente en las interacciones de Skyrme o Gogny (ecs. 3.4, 3.7) no está unívocamente determinada en las teorías proyectadas y se debe elegir una prescripción que cumpla una serie de requisitos [4]. En primer lugar este término no debe transportar momento angular, es decir:

$$\begin{aligned} &\langle \Phi^{J_1; M_1; NZ}(\vec{q}) | \hat{H}(\rho) | \Phi^{J_2; M_2; NZ}(\vec{q}) \rangle = \\ &\delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \langle \Phi^{J_1; M_1; NZ}(\vec{q}) | \hat{H}(\rho) | \Phi^{J_1; M_1; NZ}(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (6.29)$$

Por otro lado, la energía tiene que ser una magnitud real. En este trabajo se usa para la densidad espacial la prescripción proyectada en el número de

partículas (véase sec. 5.1.3) y mixta en la parte de momento angular:

$$\rho_{\vec{q}}^{Z,N}(\vec{r}, \Omega, \Omega') = \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{\rho}(\vec{r}) \hat{R}(\Omega') | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{R}(\Omega') | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} \quad (6.30)$$

En la referencia [4] se demuestra que la prescripción definida por la ecuación anterior cumple los dos requisitos mencionados anteriormente. La prescripción de una densidad completamente proyectada tanto al número de partículas como a buen momento angular también cumple las dos condiciones mencionadas. Sin embargo, para el caso de restauración de simetrías espaciales, se ha demostrado que dicha prescripción conduce a resultados por completo erróneos [12].

#### 6.1.4. Simetría axial

La restauración de la simetría rotacional requiere del cálculo de la integral triple definida en los ángulos de Euler. Esto resulta muy costoso desde el punto de vista computacional y por ello se emplean restricciones que hacen que el cálculo sea realizable. La más habitual consiste en considerar que las funciones de onda de tipo producto cumplen la simetría axial:

$$\hat{J}_z |\Phi(\vec{q})\rangle = 0; \quad e^{-i\alpha \hat{J}_z} |\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (6.31)$$

Esta condición simplifica en gran medida las fórmulas de la proyección a buen momento angular ya que permite hacer las integrales en los ángulos  $(\alpha, \gamma)$  analíticamente. Además, normalmente se consideran otras simetrías autoconsistentes en los estados de tipo producto como la paridad ( $\hat{\Pi}$ ) o la simetría simplex ( $\hat{\Pi}_1$ ):

$$\hat{\Pi} |\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (6.32)$$

$$\hat{\Pi}_1 |\Phi(\vec{q})\rangle = \hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_x} |\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (6.33)$$

En el apéndice B se realizan en detalle las simplificaciones que estas restricciones suponen. La norma y la energía proyectada a buen número de partículas y momento angular se expresan finalmente como:

$$\mathcal{N}^{NZ;J}(\vec{q}) = \int_0^{\pi/2} d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) n^{NZ}(\vec{q}, \beta) \quad (6.34)$$

$$E^{NZ;J}(\vec{q}) = \frac{\mathcal{H}^{NZ;J}(\vec{q})}{\mathcal{N}^{NZ;J}(\vec{q})} = \frac{\int_0^{\pi/2} d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) e^{NZ}(\vec{q}, \beta) n^{NZ}(\vec{q}, \beta)}{\int_0^{\pi/2} d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) n^{NZ}(\vec{q}, \beta)} \quad (6.35)$$

donde  $d_{KK'}^J(\beta)$  son las funciones de Wigner reducidas [10].

### 6.1.5. Métodos de proyección a buen momento angular

Dependiendo del método variacional con el que se hallen las funciones de onda de tipo producto  $|\Phi(\vec{q})\rangle$  y los coeficientes  $a_K^J$  que definen las funciones de onda proyectadas (ec. 6.10) se tendrán mejores o peores aproximaciones a la solución exacta del problema. En esta sección se van a comentar las limitaciones de tipo computacional que surgen en el marco de la proyección a buen momento angular en contraste con la restauración de la simetría del número de partículas que se vio en el capítulo anterior. Para ello se describirán los métodos de variación después de la proyección (VAP<sub>J</sub>) y proyección después de la variación (PAV<sub>J</sub>) a buen momento angular con las funciones de onda definidas en la expresión (ec. 6.10). Además, dentro de estos últimos se discutirá la restauración de la simetría rotacional sin la proyección a buen número de partículas, ya que dicho método ha sido ampliamente usado con la interacción de Gogny [2, 3, 4, 5].

#### Método VAP<sub>J</sub>

En este caso se minimiza la energía proyectada para cada valor del momento angular  $J$  usando como parámetros variacionales tanto los coeficientes de la transformación de HFB ( $U, V$ ) que definen las funciones de onda intrínsecas como los coeficientes  $a_K^J$  en el desarrollo dado por la expresión (ec. 6.10). Esto da lugar a dos ecuaciones variacionales acopladas<sup>1</sup> [9]:

$$\delta [E^{J;NZ}] = 0 \Rightarrow \begin{cases} \sum_{K'} a_{K'}^J \langle \Phi | \left( \hat{H} - E^{J;NZ} \right) P_{KK'}^J P^N P^Z | \Phi \rangle = 0 \\ \sum_{KK'} a_K^{J*} a_{K'}^J \langle \delta \Phi | \left( \hat{H} - E^{J;NZ} \right) P_{KK'}^J P^N P^Z | \Phi \rangle = 0 \end{cases} \quad (6.36)$$

Es evidente que este método requiere un esfuerzo computacional formidable ya que implica un aumento del número de ecuaciones variacionales y requiere de una proyección triaxial completa para cada valor del momento angular  $J$ . Lamentablemente este método está fuera del alcance de las capacidades actuales de cálculo con interacciones fenomenológicas efectivas (Gogny, Skyrme, relativistas) en espacios de configuración grandes. En el caso de tener funciones de onda con simetría axial el método se simplifica, aunque de nuevo el coste computacional sigue siendo muy grande.

<sup>1</sup>Para simplificar la notación suponemos que no se restringe el cálculo a los parámetros  $\{\vec{q}\}$

## Métodos PAV<sub>J</sub> y RVAP<sub>J</sub>

En el método de proyección a buen momento angular después de la variación, las funciones de onda intrínsecas  $|\Phi(\vec{q})\rangle$  se obtienen minimizando la energía a nivel de campo medio (HFB, LN) o a nivel de la proyección a buen número de partículas (VAP) como en los métodos comentados en el capítulo anterior. Sólo posteriormente se evalúa la energía proyectada con la expresión (ec. 6.28). Los coeficientes del desarrollo  $a_K^J$  se hallan variacionalmente como en el caso VAP<sub>J</sub> descrito más arriba aunque, obviamente, la variación en la función de onda intrínseca no se realiza:

$$a_K^J \Rightarrow \sum_{K'} a_{K'}^J \langle \Phi | \left( \hat{H} - E^{J,NZ} \right) P_{KK'}^J P^N P^Z | \Phi \rangle = 0 \quad (6.37)$$

Sin embargo, si los cálculos se realizan con funciones de onda axialmente simétricas (sec. 6.1.4) esta variación es innecesaria ya que los coeficientes están ya determinados por la normalización de la función de onda, con lo que la energía proyectada simultáneamente a buen número de partículas y momento angular se obtiene directamente evaluando la expresión (ec. 6.35).

De manera equivalente al caso de la proyección a buen número de partículas, también se pueden hacer aproximaciones a la energía VAP<sub>J</sub> mediante los métodos de variación después de la proyección restringida (RVAP<sub>J</sub>). En este caso se exploran las superficies de energía potencial proyectadas a buen momento angular definidas en las direcciones más relevantes  $\{\vec{q}\}$ , que suelen ser las deformaciones colectivas con un orden multipolar más bajo. De hecho, en prácticamente todos los cálculos con proyección a buen momento angular con interacciones efectivas hechos hasta el momento, sólo se explora la superficie proyectada en el grado de libertad cuadrupolar axial  $q_{20}$  (o, equivalentemente, la deformación  $\beta$ ). Esto se debe a que, en principio, la deformación cuadrupolar es el grado de libertad más importante en relación con la restauración de la simetría rotacional [11]. En la sección (sec. 6.1.6) se mostrarán superficies de energía potencial definidas a lo largo de  $q_{20}$  estudiando, a modo de ejemplo, el núcleo  $^{54}\text{Cr}$  visto en el capítulo anterior.

En la primera implementación de la restauración de la simetría rotacional hecha con la interacción de Gogny se proyectaban funciones de onda de tipo HFB a buen momento angular y no se incluía la proyección a buen número de partículas [2, 3, 4, 5]. Por tanto, en tal caso las expresiones que se han presentado aquí se simplifican imponiendo directamente que los proyectores correspondientes sean iguales a la identidad ( $P^{N\tau} = 1$  ó  $\varphi_\tau = 0$ ). Con esta aproximación, obviamente se pierden las correlaciones de apareamiento más

### 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

allá de campo medio que se obtienen con la restauración de la simetría del número de partículas. Además, las funciones de onda así construidas no tienen en promedio el número de partículas correcto, ya que esta condición se impone en las funciones de onda producto y no en las proyectadas:

$$N_{\tau}^J(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{N}_{\tau} | \Phi^J(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^J(\vec{q}) | \Phi^J(\vec{q}) \rangle} = N_{\tau} \pm \delta N_{\tau} \quad (6.38)$$

En tales casos se asume que las desviaciones  $\delta N_{\tau}$  son pequeñas y se añade una corrección a la energía proyectada dada por [4]:

$$E_{\text{corr}}^J(\vec{q}) = E^J(\vec{q}) - \lambda_N(\vec{q}) (N^J(\vec{q}) - N) - \lambda_Z(\vec{q}) (Z^J(\vec{q}) - Z) \quad (6.39)$$

donde  $N, Z$  son el número de neutrones y protones correcto y  $\lambda_N(\vec{q}), \lambda_Z(\vec{q})$  los multiplicadores de Lagrange obtenidos en el cálculo de HFB.

#### 6.1.6. Estudio de las superficies de energía potencial proyectadas a $N, Z, J$

Para ilustrar los principales aspectos de la proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular, en este apartado se estudian las superficies de energía potencial proyectadas a lo largo de la dirección ( $q_{20}$ ) para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Como en el capítulo anterior, los cálculos se realizan con la interacción de Gogny D1S en un espacio de configuración de once capas de oscilador.

En la figura 6.1 se representa la energía proyectada a buen número de partículas (líneas discontinuas) y a distintos valores del momento angular  $J$  (ec. 6.35). Asimismo, en el panel inferior de la figura se muestran las normas proyectadas (ec. 6.34), todo ello en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$ . Como vimos en el capítulo anterior, las funciones de onda intrínsecas de tipo producto se pueden hallar con distintas aproximaciones dependiendo del funcional que se minimice (HFB, LN, RVAP, VAP). En este caso representamos los resultados usando funciones de onda HFB (fig. 6.1(a),(d)), LN (fig. 6.1(b),(e)) y VAP (fig. 6.1(c),(f)). Como se ve en la figura, el efecto de la restauración de la simetría rotacional es notable así como las diferencias entre los distintos métodos.

En primer lugar observamos que aparecen distintas curvas que se corresponden con los distintos valores del momento angular. Para  $J = 0$  se consigue la mayor ganancia de energía, como corresponde a un núcleo par-par. Esta energía de correlación, que se obtiene al restaurar la simetría rotacional, se

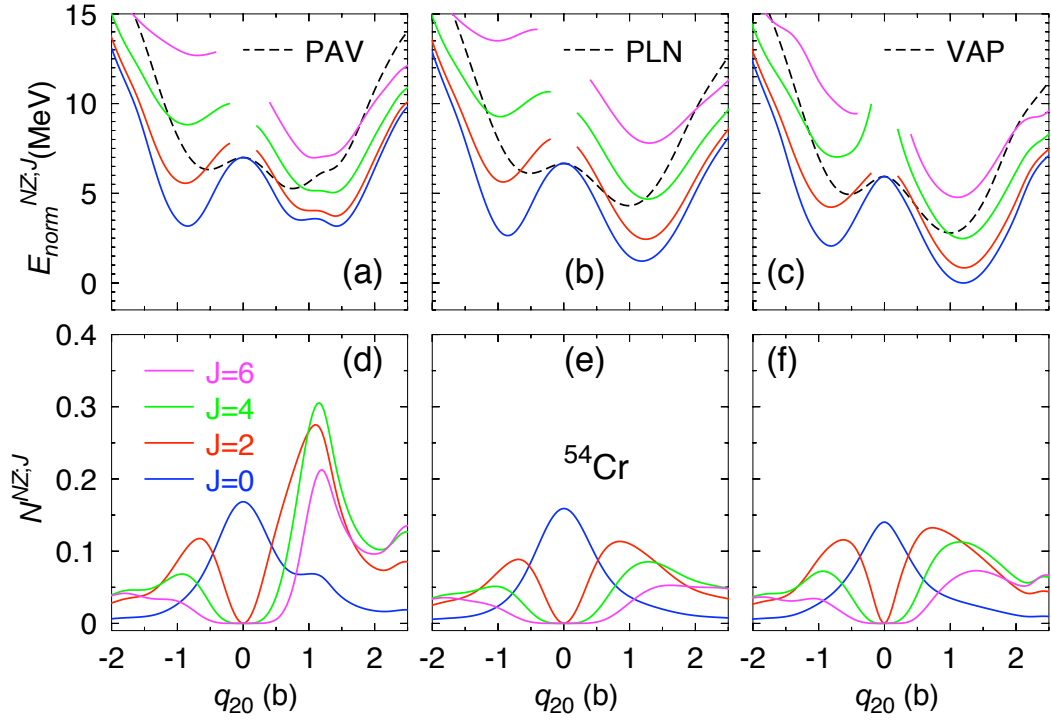


Figura 6.1: Norma y energía (normalizada) proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular ( $J = 0$  azul,  $J = 2$  rojo,  $J = 4$  verde y  $J = 6$  magenta) en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$  con funciones de onda intrínsecas (a)-(d) HFB, (b)-(e) LN y (c)-(f) VAP para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . En línea discontinua se muestra la superficie proyectada a buen número de partículas en cada caso, PAV (HFB), PLN(LN) y VAP. Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la superficie con  $J = 0$  calculada con funciones de onda VAP.

estima a partir de las diferencias entre las energías de los mínimos correspondientes a las curvas proyectadas sólo a buen número de partículas y las superficies con  $J = 0$ . Las ganancias son aproximadamente 2.3, 3.0 y 2.7 MeV para los métodos HFB (PAV), LN (PLN) y VAP respectivamente. Además, los mínimos oblado y prolado de la superficie sin proyectar a momento angular (línea discontinua) aparecen en las curvas proyectadas a  $J = 0, 2, 4, 6$  desplazados.

Por otra parte, también se observan diferencias significativas entre los resultados obtenidos con funciones HFB, LN y VAP. Ya a simple vista se aprecia que las superficies proyectadas a buen número de partículas y momento angular ( $J = 0, 2, 4$ ) con funciones de onda de HFB presentan una

### 6.1. Restauración simultánea de las simetrías del número de partículas y rotacional

estructura de dos mínimos entre  $0.5 \leq q_{20} \leq 1.5$  (b) (fig. 6.1(a)), mientras que sólo aparece un mínimo en los casos LN y VAP proyectados (g. 6.1(b)-(c)). Además, en estos últimos casos el mínimo prolado está más bajo en energía que el oblado ( $\approx 1.2$  MeV con el método LN y  $\approx 2$  MeV con el VAP), mientras que en el primero se tienen dos mínimos casi degenerados en el lado prolado y oblado. Estas diferencias se deben a las correlaciones de apareamiento que, como veíamos en el capítulo anterior, se anulan en la aproximación HFB alrededor de  $q_{20} = 1.2$  (b). Como consecuencia, se obtiene esa estructura espuria en la energía (fig. 6.1(a)).

No obstante, las diferencias no sólo se limitan a los resultados HFB sino que también se observan diferencias notables entre la proyección a buen momento angular de las superficies LN y VAP (fig. 6.1(b)-(c)). En estos casos vemos que la distancia relativa alrededor de los mínimos entre las curvas proyectadas es menor en el caso VAP que en el LN (espectro más comprimido). Además, para  $J = 0$  las barreras y las diferencias de energías entre los mínimos también son distintas en ambos casos. Así, en el cálculo con funciones VAP se tiene una barrera de potencial de alrededor de 6 MeV entre el mínimo absoluto prolado ( $q_{20} = 1.2$  b) y el mínimo oblado ( $q_{20} = -0.8$  b), y las energías correspondientes a dichos mínimos difieren entre sí 2 MeV (figura 6.1(a)). Sin embargo, para el caso con funciones de onda LN se tiene una diferencia de energía entre los mínimos de alrededor de 1.2 MeV separados por una barrera de 5.5 MeV. Como se verá más adelante, estas diferencias afectarán también a los cálculos con el generador de coordenadas, ya que la topología de las superficies de energía potencial determina en gran medida la forma de las funciones de onda colectivas.

Las figuras (6.1(a)-(c)) muestran además que el caso  $q_{20} = 0$  es especial. Por un lado, con la proyección a buen momento angular con  $J = 0$  no se obtiene ganancia de energía, mientras que para los estados excitados  $J > 0$  se tiene una discontinuidad. Este hecho se puede inferir del panel inferior de la figura 6.1, donde se representan las normas proyectadas para los distintos valores de  $J$  en función de la deformación cuadrupolar. El valor de esta norma representa el cuadrado del coeficiente del desarrollo en autofunciones de los operadores  $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{N}, \hat{Z}\}$  de la función de onda intrínseca  $|\Phi(q_{20})\rangle$ :

$$\begin{aligned}
 |\Phi(q_{20})\rangle &= \sum_{NZ;JM} a_{NZ;JM} |NZ; JM\rangle \\
 \rightarrow \mathcal{N}^{NZ;J}(q_{20}) &= \langle \Phi(q_{20}) | P^{JM} P^N P^Z | \Phi(q_{20}) \rangle = |a_{NZ;JM}|^2
 \end{aligned} \tag{6.40}$$

Es decir, con esta cantidad expresamos si es posible construir autoestados con valores determinados de  $(N, Z, J)$  a partir del estado producto. Cuando estas normas sean cero (o muy próximas a cero) será imposible obtener tales autoestados a partir de esa función de onda intrínseca. Eso es precisamente lo que ocurre en  $q_{20} = 0$  para los valores de momento angular distintos de cero y se debe a que el estado intrínseco es esférico (sus momentos multipolares más altos también son pequeños). Por tanto, mediante las combinaciones lineales de las posibles rotaciones de ese estado, es decir, proyectando el estado, sólo se podrán obtener de nuevo funciones esféricas (con  $J = 0$ ). Para el resto de valores de la deformación cuadrupolar se obtienen unas normas que permiten la proyección a otros valores de momento angular.

Además, vemos de nuevo el efecto del colapso de las correlaciones de apareamiento en la figura (fig. 6.1(d)) donde se aprecia un aumento de la norma entre  $0.5 (b) \leq q_{20} \leq 1.5 (b)$ . Ello se debe a que, en tales casos, se tienen autoestados simultáneamente de los operadores  $\hat{N}, \hat{Z}$  ya a nivel de campo medio, y la probabilidad de obtener estados con ese número de partículas concreto cuando se proyecta es la unidad, como se vio en la figura (fig. 5.10(b)).

Para completar el análisis de las superficies de energía potencial proyectadas a buen momento angular, representamos en la figura (fig. 6.2) los resultados correspondientes a la restauración de la simetría rotacional con funciones de onda HFB sin proyectar a buen número de partículas (ec. 6.39). De nuevo vemos que existen diferencias apreciables entre las superficies de energía proyectadas calculadas con este método y las mostradas con el método VAP (fig. 6.1(c)). Además, mientras que en este último todas las curvas tienen el valor correcto del número de protones y de neutrones ( $Z = 24$ ,  $N = 30$ ), en las figuras (fig. 6.2(c)-(d)) vemos que existen fluctuaciones en el valor proyectado del número de partículas. Sólo en las regiones de  $q_{20}$  donde la función de onda producto no rompe la simetría del número de partículas se tiene el valor correcto. Sin embargo, en esas zonas no se incluyen correlaciones de apareamiento. Por tanto, la aproximación que aquí se propone (proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular con funciones de onda VAP) supone una mejora metodológica sustancial con respecto a la restauración de la simetría rotacional con la interacción de Gogny hecha anteriormente [2, 3, 4, 5].



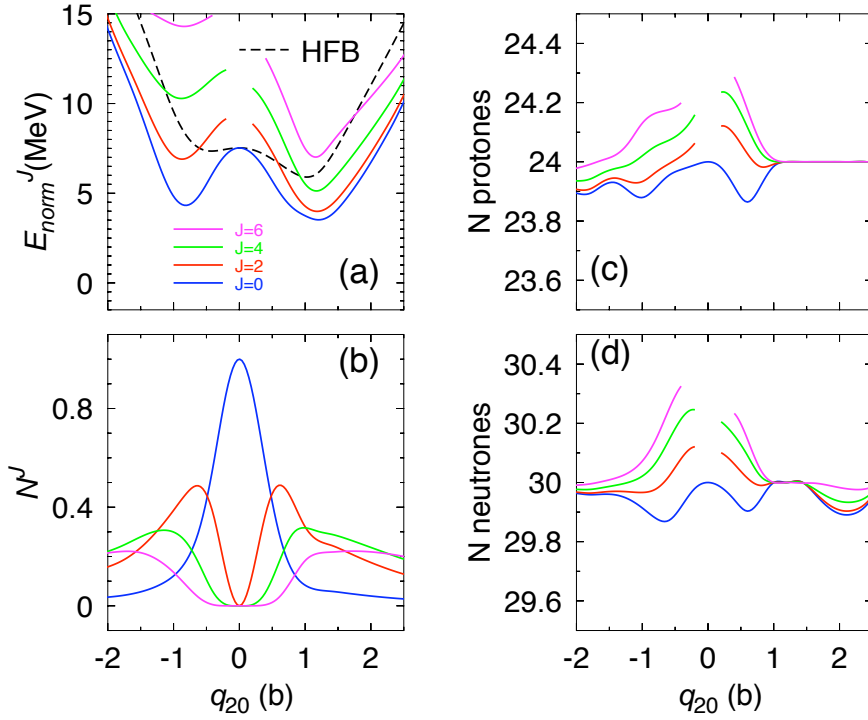


Figura 6.2: (a) Energía (normalizada), (b) norma, (c) número de protones y (d) número de neutrones, calculados con funciones de onda proyectadas a buen momento angular ( $J = 0$  azul,  $J = 2$  rojo,  $J = 4$  verde y  $J = 6$  magenta) en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$  con funciones de onda intrínsecas HFB para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la superficie con  $J = 0$  calculada con funciones de onda VAP.

## 6.2. Conceptos generales del método GCM

La función de onda resultante de la proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular contiene importantes correlaciones más allá del campo medio que provienen de la restauración de las simetrías del hamiltoniano. En esta sección veremos que se pueden incluir más correlaciones asociadas a las fluctuaciones cuánticas en los parámetros colectivos como, por ejemplo, las deformaciones. Esto se puede conseguir con el método de la coordenada generadora (sec. 4.2.1) o GCM. Como se mencionó en el capítulo 4, el GCM se basa en la mezcla de configuraciones para lograr funciones de onda que se aproximen mejor a los estados exactos del hamiltoniano. En nuestro caso, las funciones de onda que se mezclan para construir los estados

GCM se obtienen a partir de la proyección simultánea a buen número de partículas y momento angular de estados producto intrínsecos,  $|\Phi(\vec{q})\rangle$ , que dependen de una serie de variables colectivas  $\{\vec{q}\}$ . Estos últimos se obtienen, como ya se ha mencionado, con los métodos HFB, LN o VAP con ligaduras. Por tanto, se sigue un procedimiento variacional en el que las funciones de onda prueba ahora tienen esta forma:

$$|\Psi^{NZ;J;\sigma}\rangle = \int f^{NZ;J;\sigma}(\vec{q}) |\Phi^{NZ;J}(\vec{q})\rangle d\vec{q} \quad (6.41)$$

donde a las variables  $\{\vec{q}\}$  se les suele llamar coordenadas generadoras o generatrices y  $f^{NZ;J;\sigma}(\vec{q})$  son los únicos parámetros variacionales.

Vemos que este método es muy general y que su éxito depende en gran medida tanto de la calidad del espacio de Hilbert reducido definido por los estados proyectados  $\{|\Phi^{NZ;J}(\vec{q})\rangle\}$  como de la elección de la coordenada generadora. Normalmente, con este tipo de cálculos se está interesado en estudiar las correlaciones asociadas a las deformaciones intrínsecas del sistema y la más importante es la deformación cuadrupolar. Además, como la restauración de la simetría rotacional con interacciones efectivas sólo se puede realizar de momento con funciones de onda intrínsecas axiales, se escoge la deformación cuadrupolar axial como la coordenada generadora ( $\{\vec{q}\} = q_{20}$ ). No obstante, la generalidad de este método permite estudiar otros grados de libertad que pueden ser más relevantes en algún problema concreto como, por ejemplo, la deformación octupolar con funciones de onda HFB [13].

Con estas consideraciones se ha supuesto que el generador es unidimensional, aunque de nuevo la ecuación (ec. 6.41) es mucho más general. Sin embargo, como se verá a continuación, la inclusión de más coordenadas generadoras, aunque en algunos casos puede resultar muy conveniente, implicaría un coste computacional muy grande.

### 6.2.1. Ecuación de Hill-Wheeler-Griffin

Siguiendo las expresiones que se comentaron en el capítulo 4, la minimización de la energía con las funciones de onda prueba GCM (ec. 6.41) conduce a una ecuación de autovalores generalizada conocida como la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin (ec. 4.25) [14, 15]. En este caso será:

$$\int \left( \mathcal{H}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) - E^{NZ;J\sigma} \mathcal{N}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) \right) f^{NZ;J;\sigma}(q'_{20}) dq'_{20} = 0 \quad (6.42)$$

## 6.2. Conceptos generales del método GCM

donde se ha definido la energía como:

$$E^{NZ;J;\sigma} = \frac{\int f^{NZ;J;\sigma*}(q_{20}) \mathcal{H}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) f^{NZ;J;\sigma}(q'_{20}) dq_{20} dq'_{20}}{\int f^{NZ;J;\sigma*}(q_{20}) \mathcal{N}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) f^{NZ;J;\sigma}(q'_{20}) dq_{20} dq'_{20}} \quad (6.43)$$

y los solapes de la norma y del hamiltoniano proyectados a buen número de partículas y momento angular:

$$\mathcal{N}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) = \langle \Phi^{NZ;J}(q_{20}) | \Phi^{NZ;J}(q'_{20}) \rangle \quad (6.44)$$

$$\mathcal{H}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) = \langle \Phi^{NZ;J}(q_{20}) | \hat{H} | \Phi^{NZ;J}(q'_{20}) \rangle \quad (6.45)$$

La manera en la que se calculan estos solapes se detalla los apéndices A-B y es una generalización del cálculo que se ha mencionado en la sección anterior.

El procedimiento usual para resolver la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin (ec. 6.52) consiste en transformar el problema en una ecuación de autovalores normal [9]. Para ello, se construyen a partir de los autovectores de la matriz de los solapes de la norma unos estados ortonormales en los que se desarrolla la función de onda prueba dada por la expresión (ec. 6.41). A estas nuevas funciones se les denomina *estados naturales* que se definen como:

$$|k^{NZ;J}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k^{NZ;J}}} \int u_k^{NZ;J}(q_{20}) |\Phi^{NZ;J}(q_{20})\rangle dq_{20} \quad (6.46)$$

$$\int \mathcal{N}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) u_k^{NZ;J}(q_{20}) dq_{20} = n_k^{NZ;J} u_k^{NZ;J}(q_{20}) \quad (6.47)$$

Estos estados son ortonormales por construcción. Debido a que las funciones de onda proyectadas  $|\Phi^{NZ;J}(q_{20})\rangle$  no son ortogonales, habrá autovalores  $n_k^{NZ;J}$  de la matriz de los solapes de la norma que serán cero, por lo que no se deben tener en cuenta en la construcción de los estados naturales. Como se verá en la sección (sec. 6.2.3), se puede estudiar la convergencia de las soluciones a medida que se incluyen estados naturales con autovalor de la norma más pequeño en el desarrollo de la función de onda GCM [18, 19]. Dicha expansión se expresa como:

$$|\Psi^{NZ;J;\sigma}\rangle = \sum_{k, n_k^{NZ;J} \neq 0} g_k^{NZ;J;\sigma} |k^{NZ;J}\rangle \quad (6.48)$$

Con estas consideraciones, la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin se escribe finalmente como una ecuación de autovalores usual:

$$\sum_{k', n_{k'}^{NZ;J} \neq 0} \langle k^{NZ;J} | \hat{H} | k'^{NZ;J} \rangle g_{k'}^{NZ;J;\sigma} = E^{NZ;J;\sigma} g_k^{NZ;J;\sigma} \quad (6.49)$$

$$\langle k^{NZ;J} | \hat{H} | k'^{NZ;J} \rangle =$$

$$\int \left[ u_k^{NZ;J}(q_{20}) \right]^* \mathcal{H}^{NZ;J}(q_{20}, q'_{20}) u_k^{NZ;J}(q'_{20}) \frac{dq_{20} dq'_{20}}{\sqrt{n_k^{NZ;J} n_{k'}^{NZ;J}}} \quad (6.50)$$

Por tanto, resolviendo la ecuación (ec. 6.49) obtenemos las energías  $E^{NZ;J;\sigma}$  y los coeficientes  $g_k^{NZ;J;\sigma}$  que determinan las funciones de onda GCM. Con estos últimos se pueden determinar los valores esperados de cualquier operador entre funciones de onda GCM, incluyendo los operadores asociados con las transiciones electromagnéticas (véanse los apéndices B-C). Además, se puede construir la denominada función de onda colectiva:

$$G^{NZ;J;\sigma}(q_{20}) = \sum_k g_k^{NZ;J;\sigma} u_k^{NZ;J}(q_{20}) \quad (6.51)$$

El cuadrado de esta expresión tiene el significado de la densidad de probabilidad de encontrar el sistema con una deformación intrínseca  $q_{20}$ , con lo que es muy útil a la hora de interpretar físicamente los estados finales.

Al igual que se comentó en un apartado anterior (sec. 6.1.5), la primera implementación del método de la coordenada generadora con funciones de onda proyectadas a buen momento angular con la interacción de Gogny no incluía la restauración de la simetría del número de partículas [4]. Por tanto, la función de onda GCM, definida por la expresión (ec. 6.41) con  $P^N = P^Z = 1$ , no es ni autoestado de los operadores número ni tiene el valor promedio correcto. Para corregir parcialmente estos efectos, la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin se modifica, quedando [18]:

$$\int \left[ \bar{\mathcal{H}}^J(q_{20}, q'_{20}) - E^{J\sigma} \mathcal{N}^J(q_{20}, q'_{20}) \right] f^{J;\sigma}(q'_{20}) dq'_{20} = 0 \quad (6.52)$$

con

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}^J(q_{20}, q'_{20}) = \mathcal{H}^J(q_{20}, q'_{20}) & - \bar{\lambda}_N \left( \langle \Phi^J(q_{20}) | \hat{N} | \Phi^J(q'_{20}) \rangle - N \right) \\ & - \bar{\lambda}_Z \left( \langle \Phi^J(q_{20}) | \hat{Z} | \Phi^J(q'_{20}) \rangle - Z \right) \end{aligned} \quad (6.53)$$

donde  $\bar{\lambda}_N, \bar{\lambda}_Z$  son los promedios de los multiplicadores de Lagrange obtenidos a nivel de campo medio.

### 6.2.2. Término dependiente de la densidad

Como en los casos anteriores, se tiene que escoger una prescripción de la densidad espacial que satisfaga las condiciones de invariancia bajo rotaciones y de realidad para la energía calculada a partir de dicha densidad. En este caso se elige de nuevo la prescripción proyectada a buen número de partículas y mixta en la proyección a buen momento angular. Basándonos en el teorema de Wick se puede extender la definición dada en la expresión (ec. 6.30) a los elementos no diagonales [4]:

$$\rho_{q_{20}, q'_{20}}^{Z,N}(\vec{r}, \beta) = \frac{\langle \Phi^{NZ}(q_{20}) | \hat{\rho}(\vec{r}) e^{-i\beta \hat{J}_x} | \Phi^{NZ}(q'_{20}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(q_{20}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} | \Phi^{NZ}(q'_{20}) \rangle} \quad (6.54)$$

### 6.2.3. Comparaciones numéricas

A continuación analizamos el núcleo  $^{54}\text{Cr}$  como ejemplo de aplicación del método del generador de coordenadas estudiado en las secciones precedentes. En las implementaciones prácticas del GCM, la coordenada generadora continua  $q_{20}$  se discretiza en un conjunto de puntos  $\{q_{20}^i\}_{i=1, \dots, N_{\text{GCM}}}$ . Por tanto, las expresiones integrales se sustituyen por sumas y todo el cálculo se convierte en un problema de diagonalización de matrices finitas. En el ejemplo del  $^{54}\text{Cr}$  que presentamos en esta sección se ha usado una malla con  $N_{\text{GCM}} = 36$  puntos equiespaciados en un intervalo de deformación cuadrupolar  $q_{20} \in [-2.2, 4.8]$  (b). De nuevo se ha usado la interacción de Gogny D1S y un espacio de configuración de once capas de oscilador.

En primer lugar, se construyen los solapes de la norma y del hamiltoniano proyectados a buen número de partículas y momento angular. En la figura 6.3 representamos las matrices correspondientes a dichos solapes calculados con funciones de onda intrínsecas VAP. Los elementos diagonales de dichas matrices se corresponden con las normas y las superficies de energía potencial proyectadas que se representan en la figura 6.1(c),(f). Además, esta figura muestra la relevancia de los elementos fuera de la diagonal. Para  $J = 0$  la norma tiene un máximo en el punto  $(q_{20}, q'_{20}) = (0, 0)$  (b) y decae de forma suave con cierta asimetría ya que se tiene una disminución más significativa en el lado oblado que en el prolado. Para  $J = 2$  (y superiores) la norma se caracteriza por tener un valor nulo en las direcciones  $(q_{20}, q'_{20}) = (0, q'_{20})$  y  $(q_{20}, q'_{20}) = (q_{20}, 0)$  debido a la esfericidad de alguno de los estados intrínsecos.

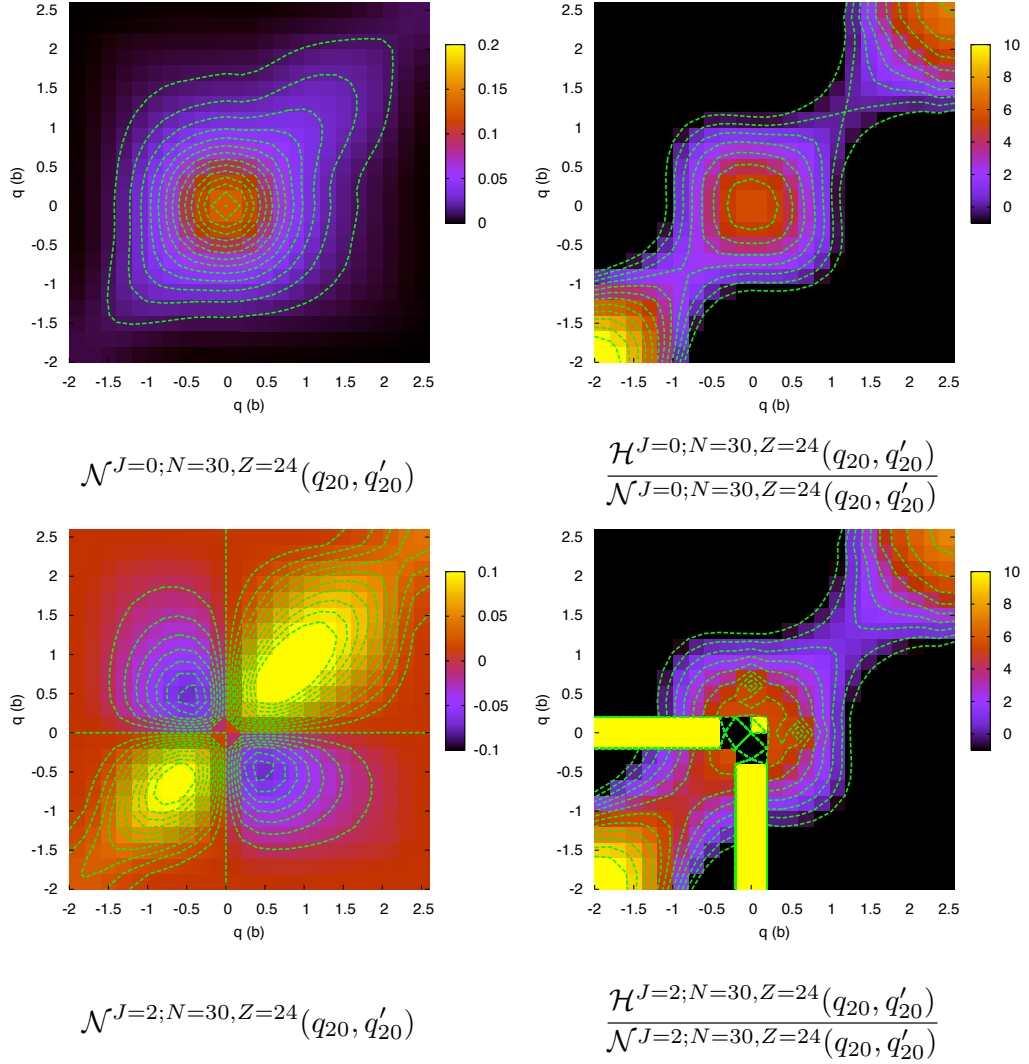


Figura 6.3: Matrices de solapes de la norma (panel de la izquierda) y de la energía (panel de la derecha) proyectadas a buen número de partículas y momento angular ( $J = 0$  panel superior,  $J = 2$  panel inferior) calculadas con funciones de onda intrínsecas VAP en el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la diagonal con  $J = 0$ . Las curvas de nivel se diferencian en 0.01 unidades en el caso de la norma y de 1 MeV en el caso de la energía.

Esto se refleja en el solape del hamiltoniano en las bandas de color amarillo del panel inferior derecho de la figura 6.3, donde el cálculo de la energía carece de sentido. Además, aparecen en la norma con  $J = 2$  máximos en las regiones oblado-oblado ( $-1 \leq q_{20} \leq -0.5$ ) y prolado-prolado ( $0.5 \leq q_{20} \leq 1.5$ ), así como mínimos en la región oblado-prolado  $(q_{20}, q'_{20}) \approx (-0.5, 0.5)$ .

Estos resultados indican que las aproximaciones basadas en una dependencia gaussiana de los solapes de la norma (*Gaussian Overlap Approximation, GOA*) [16] no se pueden aplicar para  $J \neq 0$ . Incluso para el solape con  $J = 0$  la GOA estándar tampoco resulta ser adecuada, aunque con ciertas modificaciones se consiguen buenas aproximaciones para este solape calculando sólo unas pocas diagonales [17]. No obstante, en este trabajo se calcularán exactamente todos los solapes.

A continuación, se diagonalizan las matrices de los solapes de la norma (ec. 6.47) para construir los estados naturales (ec. 6.46). Debido a la dependencia lineal que existe entre los estados proyectados  $\{|\Phi^{NZ;J}(q_{20})\rangle\}$ , hay autoestados de la norma que se anulan. Por tanto, existe un número máximo de estados naturales para cada  $J$  que se pueden extraer del conjunto no ortonormal original. Este número máximo es menor que el número de estados ( $N_{\text{GCM}}$ ) y se escoge imponiendo un valor umbral para el autovalor más pequeño en la norma. Además, el método converge si se observa un *plateau* en la energía calculada en función del número de autovalores de la norma que entran en la definición de los estados naturales (los  $n_k^{NZ;J}$  de la ecuación 6.46), cuando dichos autovalores se ordenan de mayor a menor [18, 19]. En la figura (fig. 6.4(a)-(b)) se muestran las energías *yrast* ( $\sigma = 0$ ) calculadas con el método del generador de coordenadas en función del número de autovalores así como el logaritmo decimal de dichos autovalores de la matriz de los solapes de la norma correspondientes (fig. 6.4(c)-(d)). En el panel de la izquierda (derecha) se representa el resultado obtenido con funciones de onda intrínsecas que provienen del método LN (VAP).

En primer lugar, notamos que los autovalores de la norma decrecen exponencialmente tanto en el caso LN como en el VAP. En cuanto a la convergencia del método, en la figura (fig. 6.4(a)-(b)) se muestran los *plateaus* de la energía en función del número de autovalores de la norma. Por un lado, vemos que para los estados excitados se tienen *plateaus* más extensos, alcanzándose antes la dependencia lineal en  $J = 0; \sigma = 0$  que en el resto de momentos angulares. Lo mismo ocurre si comparamos los resultados con funciones de onda intrínsecas VAP y los obtenidos con las funciones LN. Es decir, se alcanza la dependencia lineal de la base natural antes en el último caso que

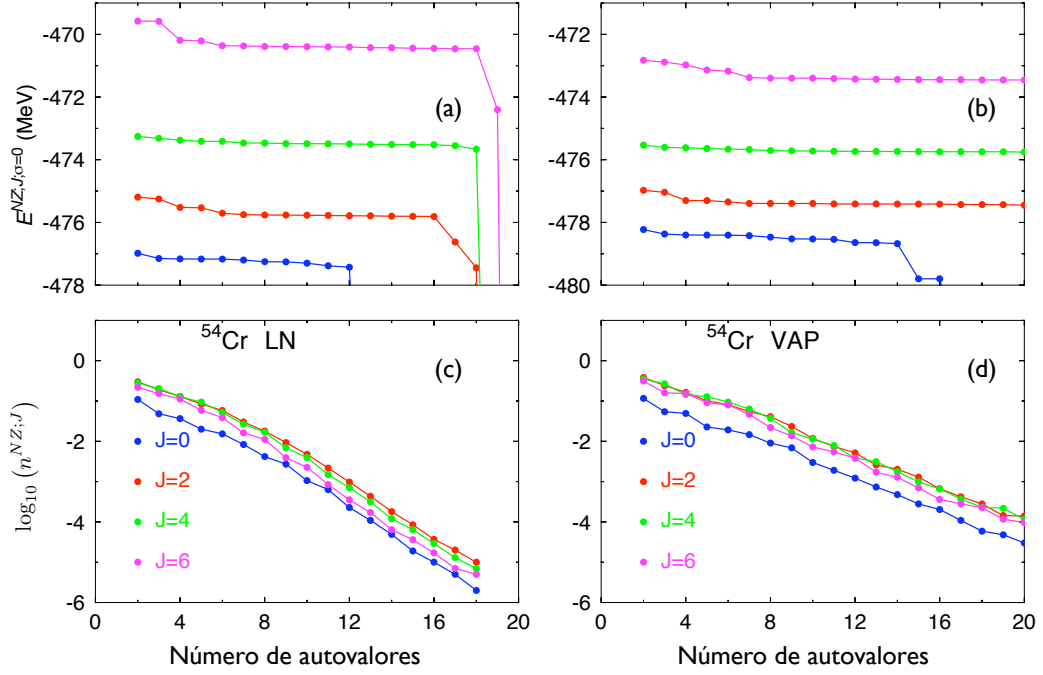


Figura 6.4: Energía GCM en función del número de autovalores de la norma, ordenados de mayor a menor, que se usan en la base natural calculados para distintos valores del momento angular ( $J = 0; \sigma = 0$  azul,  $J = 2; \sigma = 0$  rojo,  $J = 4; \sigma = 0$  verde y  $J = 6; \sigma = 0$  magenta) y con funciones de onda intrínsecas que se proyectan simultáneamente a buen número de partículas y momento angular (a) LN y (b) VAP. En el panel inferior (c)-(d) se muestra el logaritmo decimal de los autovalores de la matriz de los solapes de la norma correspondientes a cada caso.

en el primero. Esto se debe principalmente a que se tienen autovalores de la norma mayores con momentos angulares  $J \neq 0$ , y, para un mismo valor del momento angular, los autovalores de la norma VAP son mayores que los correspondientes a la norma LN. En cualquier caso, lo más importante es que en todos los casos se obtiene la condición de *plateau*, que determina la convergencia del método, y no tanto la longitud de los mismos.

En la figura (fig. 6.5) se muestra el resultado final del cálculo con el método del generador de coordenadas para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . En esta figura se observan los espectros obtenidos mediante la resolución de la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin con funciones de onda intrínsecas LN (fig. 6.5(a)) y VAP (fig. 6.5(b)). Aquí se muestran tanto los niveles más bajos con un momento angular dado (banda *yrast*,  $\sigma = 0$ ) como para los siguientes excitados (banda



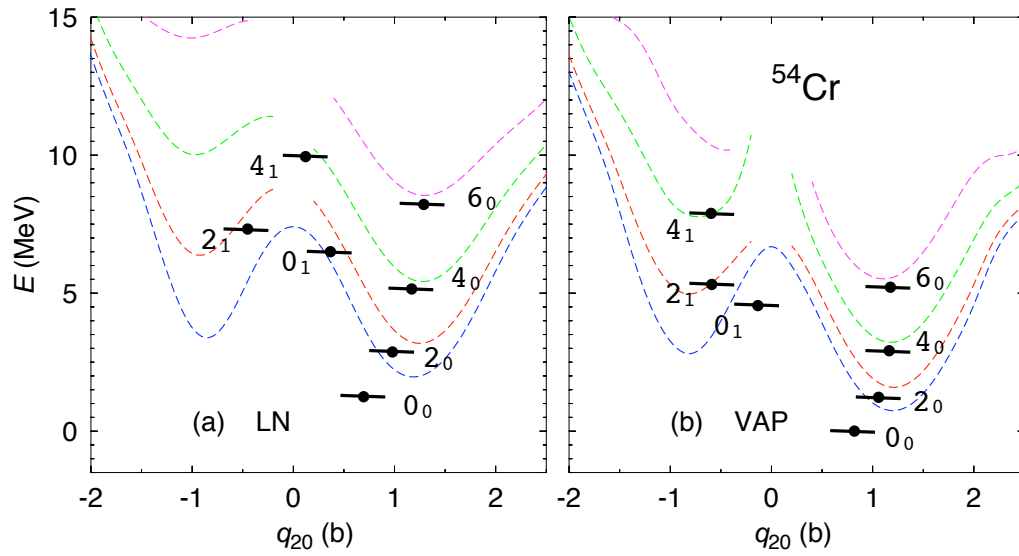


Figura 6.5: Espectro de excitación calculado con el método del generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas (a) LN y (b) VAP, para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Además, se muestran las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular en función de la deformación cuadrupolar axial. Los puntos calculados se sitúan en el valor medio de la deformación cuadrupolar. El origen de las energías es el valor del estado fundamental  $0_0$  calculado con el método GCM con funciones VAP.

*yrare*,  $\sigma = 1$ ). Además, para facilitar la interpretación física de estos estados, los niveles se representan en función de la deformación cuádrupolar axial y están localizados en el valor promedio de la deformación  $q_{20}$  definida por:

$$\bar{q}_{20}^{NZ;J;\sigma} = \int |G^{NZ;J;\sigma}(q_{20})|^2 q_{20} dq_{20} \quad (6.55)$$

Así, tanto en el caso LN como en el VAP se observa una banda *yrast* prolada con una deformación bastante similar en los estados  $J_\sigma = 0_0, 2_0, 4_0, 6_0$  de aproximadamente  $q_{20} = 1.2$  (b). Además, en el resultado con funciones de onda VAP también se observa una banda *yrare* oblada con una deformación  $-0.5$  (b) en los estados  $J_\sigma = 0_1, 2_1, 4_1$ . Sin embargo, en el caso LN no se observa dicha banda oblada y los estados dichos tienen una deformación promedio cercana a  $q_{20} = 0$  (b) para  $J_\sigma = 0_1$  y ligeramente oblada y prolada en los estados  $J_\sigma = 2_1$  y  $J_\sigma = 4_1$  respectivamente.

Aquí no se acaban las diferencias entre los métodos LN y VAP. En la figura (fig. 6.5) las energías están normalizadas al valor de la energía del estado  $0_0$  calculado con funciones de onda intrínsecas VAP. Con esta normalización se aprecia que la diferencia entre los estados fundamentales calculados con unas u otras funciones de onda es de  $\approx 1.3$  MeV que provienen principalmente de las correlaciones de apareamiento que se consiguen con el método VAP. Por otra parte, se aprecia que la energía de correlación conseguida con la mezcla de configuraciones con respecto a la energía proyectada, estimada a partir de la energía en los mínimos de las superficies proyectadas, es  $\leq 0.7$  MeV, siendo mayor en el estado fundamental que en los estados con  $J_\sigma = 2_0, 4_0, 6_0$ . Además, en este caso, dicha ganancia en energía es prácticamente independiente de las funciones de onda intrínsecas que se usen (LN o VAP). No obstante, en la figura se puede apreciar que el espectro calculado con las funciones de onda VAP está más comprimido. Este efecto ya se apreciaba a nivel de la proyección a buen momento angular (véase la figura (fig. 6.1)) y el GCM lo mantiene.

El grado de mezcla de los estados calculados con el método de la coordenada generadora se puede visualizar representando las funciones de onda colectivas (ec. 6.51). Estas funciones resultan muy útiles para interpretar físicamente dichos estados y están representadas en la figura (fig. 6.6) para los casos analizados anteriormente. Vemos que en los estados con  $\sigma = 0$  prácticamente todas las funciones de onda se localizan en la región prolada y los máximos se sitúan en una deformación que coincide con la posición del mínimo de la superficie de energía potencial proyectada correspondiente.

Además, se distingue otro máximo oblado mucho menor cerca de la posición del mínimo oblado del potencial. Para  $J_\sigma = 0_0$  este máximo es más apreciable y por ello el valor promedio de la deformación en esos estados está ligeramente desplazado, como se ve en la figura (fig. 6.5). Para los primeros estados excitados ( $\sigma = 1$ ) se observa que en el caso VAP las funciones de onda se localizan en la parte oblada, coincidiendo de nuevo los máximos con los mínimos de los pozos de potencial, excepto para el estado  $0_1$ . Sin embargo, en el cálculo con funciones de onda de LN se observa que existe cierta mezcla entre las configuraciones oblada y prolada que produce el espectro mostrado en la figura (fig. 6.5).

A continuación comparamos los resultados teóricos con los datos ex-

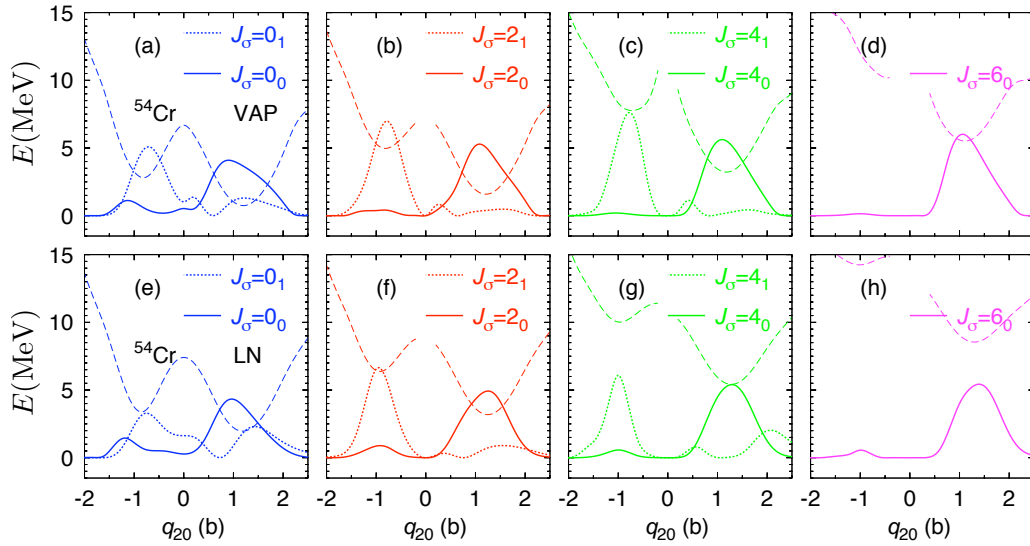


Figura 6.6: Funciones de onda colectivas (ec. 6.51) de los niveles *yrast* (líneas continuas) y *yrare* (líneas de puntos) calculadas con funciones de onda intrínsecas VAP (panel superior) y LN (panel inferior) en función de la deformación cuadrupolar intrínseca  $q_{20}$  para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Además, se representan las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas). Los valores de las energías están normalizados al valor del estado fundamental  $0_0$  calculado con el método GCM con funciones VAP.

perimentales para la banda *yrast* en la figura 6.7. En primer lugar, el método del generador de coordenadas con funciones de onda VAP se aproxima mejor al resultado empírico que el LN. No obstante, observamos que los espectros teóricos aparecen más estirados que el experimental. Este efecto es gene-

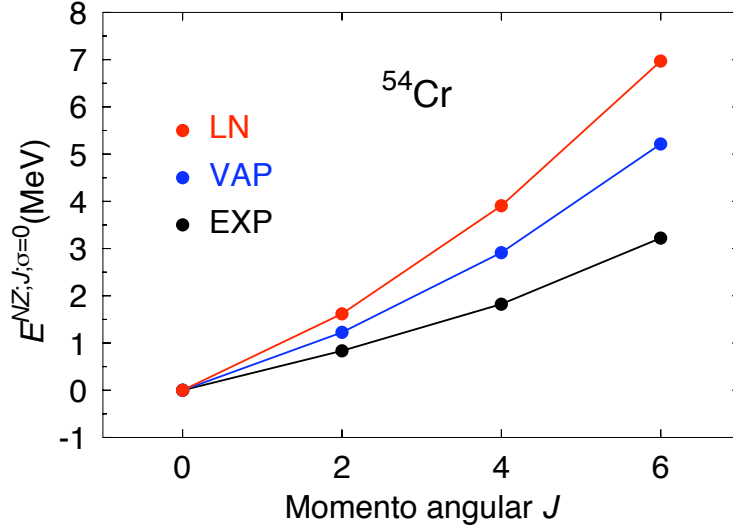


Figura 6.7: Energías de excitación de la banda *yrast* calculadas con el método GCM con funciones de onda intrínsecas VAP (círculos azules) y LN (círculos rojos) comparadas con los datos experimentales (círculos negros) [20] para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ .

ral en los cálculos hechos con el generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas axiales y se debe principalmente a la ausencia del grado de libertad triaxial. Además, la mezcla de estados intrínsecos con diferentes componentes de  $K \neq 0$  para construir el estado proyectado a buen momento angular es más importante a medida que crece el valor de  $J$ . Por otra parte, los momentos de inercia no se calculan correctamente con una proyección después de la variación axial como la que se hace aquí en el momento angular [21, 22]. En el límite de grandes deformaciones se puede demostrar que el momento de inercia que aparece en la energía proyectada  $\text{VAP}_J$  es el momento de Thouless-Valatin mientras que en el caso  $\text{PAV}_J$  es el momento de Yoccoz. En dicho límite, el modelo de *cranking*, que incluye mezclas de  $K$ , es una buena aproximación al  $\text{VAP}_J$ . En tales casos, cuando se comparan los espectros de excitación calculados con funciones de onda de *cranking* con los obtenidos con la proyección axial exacta, ambos difieren en un factor constante [2]. En cualquier caso, este hecho apenas afecta a la capacidad del método propuesto en esta tesis para describir cualitativamente la estructura nuclear a baja energía en las regiones donde la triaxialidad no juegue un papel muy importante.

Por último, mostramos en la figura (fig. 6.8) el resultado obtenido con

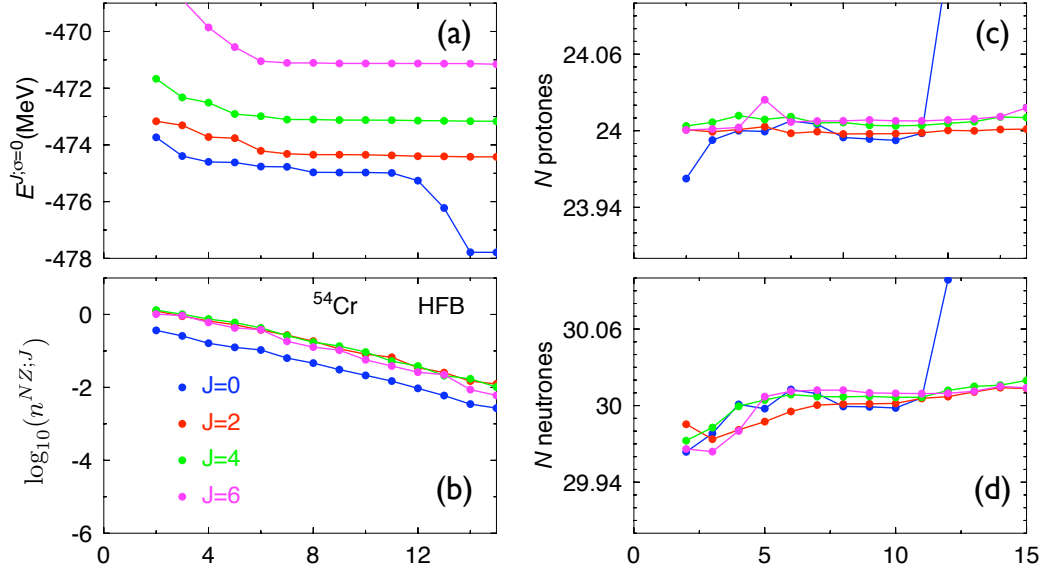


Figura 6.8: (a) Energía, (c) número de protones y (d) número de neutrones GCM en función del número de autovalores de la norma que se usan en la base natural calculados para distintos valores del momento angular ( $J = 0; \sigma = 0$  azul,  $J = 2; \sigma = 0$  rojo,  $J = 4; \sigma = 0$  verde y  $J = 6; \sigma = 0$  magenta) y con funciones de onda intrínsecas HFB que se proyectan sólo a buen momento angular. En (b) se muestran los autovalores de la matriz de los solapes de la norma correspondientes.

funciones de onda intrínsecas HFB que se proyectan a buen momento angular pero no a buen número de partículas, tal y como se realiza en la implementación del método con la interacción de Gogny anterior a la que aquí se presenta [4]. Para ello, la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin que se resuelve tiene en cuenta que las funciones de onda que entran en la mezcla no son autoestados de los operadores del número de partículas (ec. 6.53). En primer lugar apreciamos que el valor de las energías que se obtienen con este método es mayor que en los casos mostrados en la figura (fig. 6.5). Esto se debe al aumento de las correlaciones de apareamiento conseguidas tanto con la proyección a buen número de partículas como con la optimización de las funciones de onda para dicha proyección en tales casos. Por otro lado, en la figura (fig. 6.8(a)) vemos que la convergencia del método no es tan buena como en la que se muestra en la figura (fig. 6.4(a),(b)), especialmente en el estado fundamental ( $J = 0$ ). La razón principal es que el número de partículas no es el correcto en los estados proyectados. En el panel de la derecha (fig. 6.8(c)-(d)) se representa el valor esperado de protones y neutrones entre

los estados del generador en función de los autovalores que se utilizan para definir la base natural. Aquí se aprecia que las desviaciones con respecto a los valores reales de  $N$  y  $Z$  son pequeñas. Sin embargo, para  $J = 0$  las diferencias son mayores, contribuyendo a que la convergencia de este estado no sea tan buena. Evidentemente, en el caso proyectado a buen número de partículas estas diferencias no se presentan.

### 6.3. Resumen

En este capítulo se han presentado los principales aspectos del método de la coordenada generadora con funciones de onda proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular con la interacción de Gogny.

En primer lugar, se ha expuesto la restauración de la simetría rotacional y se han comentado las aproximaciones que se realizan en este trabajo debidas principalmente a limitaciones computacionales (funciones de onda axiales y proyección después de la variación a buen momento angular). En este apartado se ha estudiado la dependencia del método con las funciones de onda intrínsecas (HFB, LN, VAP) con un ejemplo numérico ( $^{54}\text{Cr}$ ), obteniéndose las siguientes conclusiones:

1. Las energías de correlación que se consiguen con la proyección a buen momento angular en los estados fundamentales son del orden de 3 MeV.
2. Las transiciones de fase que aparecen con las soluciones de HFB en la energía de apareamiento se mantienen cuando se proyectan dichos estados a buen número de partículas y momento angular. Evidentemente, este hecho no sucede con las funciones de onda intrínsecas calculadas con el método de LN o VAP.
3. Si comparamos las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular calculadas con las soluciones de LN o VAP observamos que existen diferencias significativas. Así, dependiendo de la aproximación (LN o VAP), se tienen distintas alturas de las barreras entre los mínimos oblado y prolado, diferente distancia relativa entre las superficies de energía potencial con buen momento angular, etc.
4. La proyección sólo a buen momento angular con funciones de onda HFB presenta varios problemas. Por un lado, no incluye las correlaciones de apareamiento de manera adecuada y, por otro, el número de

partículas en promedio no se corresponde con el del núcleo que se estudia. Estos inconvenientes están automáticamente resueltos incluyendo la proyección a buen número de partículas y con las funciones de onda intrínsecas VAP.

En la segunda parte del capítulo se ha presentado el método GCM escogiendo como coordenada generadora la deformación cuádrupolar axial. Además, se ha mostrado un ejemplo que pone de manifiesto los principales aspectos del método, como la forma de las matrices de los solapes de la norma y hamiltoniano, la convergencia de la energía, los espectros de excitación resultantes y la interpretación física de los estados en términos de las funciones de onda colectivas. De este ejemplo también podemos extraer las siguientes conclusiones:

1. La energía de correlación que se obtiene por la mezcla de configuraciones es del orden de 1 MeV para el estado fundamental.
2. De nuevo existen diferencias apreciables en función de las funciones de onda intrínsecas que se escogen. Así, comparando los resultados con las funciones de onda LN y VAP, se obtiene una mejor convergencia y un mejor acuerdo con los datos experimentales usando las últimas que las primeras.
3. El método GCM con funciones de onda HFB proyectadas sólo a buen momento angular converge peor que los dos casos anteriores debido principalmente a las fluctuaciones que se tienen en el valor esperado en el número de partículas.

En los siguientes capítulos se aplicará el método de la coordenada generadora con funciones de onda VAP axiales proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular para estudiar problemas candentes en física nuclear, como la aparición o degradación de los números mágicos en núcleos exóticos o las transiciones de forma en núcleos estables.

## Referencias

- [1] T. R. Rodríguez, J. L. Egidio, Phys. Rev. Lett. 99, 062501 (2007)
- [2] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 62, 054308 (2000)
- [3] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 62, 054319 (2000)
- [4] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 709, 201 (2002)
- [5] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egidio, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 65, 024304, (2002)
- [6] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121 (2003)
- [7] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 74, 064309 (2006)
- [8] R. E. Peierls, J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. (London) A 70, 381 (1957)
- [9] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [10] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam, 1961
- [11] Tomás R. Rodríguez, J. L. Egidio, L. M. Robledo, R. Rodríguez-Guzmán, Phys. Rev. C 71, 044313 (2005)
- [12] L. M. Robledo, *Technical aspects on the implementation of the GCM with density dependent forces*, Conferencia *Correlations in nuclei: beyond mean-field and shell model* (Trento, 2007) <http://www.ect.it/>
- [13] J. L. Egidio, L. M. Robledo, Nucl. Phys. A 545, 589 (1992)
- [14] D. L. Hill, J. A. Wheeler, Phys. Rev. 89, 1102 (1953)
- [15] J. J. Griffin, J. A. Wheeler, Phys. Rev. 108, 311 (1957)
- [16] P. -G. Reinhard, K. Goeke, Rep. Prog. Phys. 50, 1 (1987)
- [17] M. Bender, G. F. Bertsch, P. -H. Heenen, Phys. Rev C 69, 034340 (2004)
- [18] P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P. -H. Heenen, J. Meyer, Nucl. Phys. A 510, 466 (1990)



## Referencias

---

- [19] M. A. Fernández, J. L. Egido, Eur. Phys. J. B 48, 305 (2005)
- [20] ENDSF database, <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>
- [21] W. A. Friedman, L. Wilets, Phys. Rev. C 2, 892 (1970)
- [22] F. Villars, N. Schmeing-Rogerson, Ann. Phys. (N.Y.) 63, 443 (1971)



## Capítulo 7

# Estudio de los cierres de capas en núcleos ricos en neutrones

La existencia de los números mágicos es una de las piezas fundamentales que permite entender la estructura nuclear. Los núcleos que tienen un determinado número de protones y/o neutrones presentan sistemáticamente una serie de propiedades como mayor estabilidad, esfericidad, ausencia de excitaciones colectivas de baja energía, etc., Es bien conocido que en los núcleos estables o cerca del valle de la estabilidad, los números mágicos vienen determinados por los cierres de capas de un potencial externo de oscilador más un término de espín-órbita [1, 2]. Este potencial permite etiquetar los niveles de partícula independiente con los números cuánticos principal, momento angular orbital y momento angular total ( $n, l, j = l \pm s$ ) respectivamente. Así, a partir de este potencial se obtienen los números mágicos *clásicos* 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126. Los tres primeros se corresponden con el cierre de los niveles de oscilador ( $N_{osc} = 2(n - 1) + l = 0, 1, 2$ ) mientras que los siguientes se deben al desplazamiento de dichos niveles en función del momento angular  $j$  provocado por la interacción de espín-órbita. Sin embargo, los nuevos avances en física nuclear experimental, con el desarrollo de líneas de isótopos radiactivas y el aumento de la eficiencia de los detectores de rayos gamma, han permitido explorar la estructura de núcleos más allá del valle de la estabilidad y cerca de las líneas de goteo<sup>1</sup>. En estas regiones se ha observado experimentalmente que los números mágicos tradicionales pueden degradarse como, por ejemplo, en los núcleos  $^{32}\text{Mg}$  ( $N=20$ ) [3, 4] o  $^{42}\text{Si}$  ( $N=28$ ) [5, 6]. También se han hallado indicios experimentales de la aparición de nuevos cierres

---

<sup>1</sup>Las líneas de goteo o *drip-lines* están formadas por el isótopo de un elemento con el mayor número de neutrones posibles (línea de goteo de neutrones) o con el menor número de neutrones posibles (línea de goteo de protones), siendo dichos isótopos aún sistemas ligados.

de capas como en los núcleos  $^{52}\text{Ca}$ ,  $^{54}\text{Ti}$  y  $^{56}\text{Cr}$  ( $N=32$ ) [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13].

Desde el punto de vista del modelo de capas, la degradación y/o aparición de nuevos cierres de capas se ha estudiado a partir de la evolución de los niveles de energía de partícula independiente efectivos (*effective single particle energies*, *ESPE*) en función del número de protones y neutrones del sistema [14, 15, 16]. Estos niveles de energía se evalúan a partir del denominado hamiltoniano monopolar y su variación con el número de partículas se conoce como la deriva monopolar (*monopole drift*) [17, 18, 20]. Así, la apertura o cierre de *gaps* entre las distintas ESPE's determina en gran medida la aparición o degradación de números mágicos [14]. La parte de energía potencial del hamiltoniano monopolar se extrae a partir de los elementos de matriz que configuran la interacción efectiva a dos cuerpos en el modelo de capas  $\langle jj'|V|jj''\rangle_{JT}$ , promediando su dependencia en el momento angular  $J$  y escogiendo la parte diagonal [21]:

$$V_{jj'}^T = \frac{\sum_J (2J+1) \langle jj'|V|jj'\rangle_{JT}}{\sum_J (2J+1)} \quad (7.1)$$

donde  $j, j'$  son los momentos angulares totales de las órbitas,  $T$  es el isospín total y  $\langle jj'|V|jj'\rangle_{JT}$  los elementos diagonales de la interacción a dos cuerpos acoplados a un espín e isospín total  $(J, T)$ .

A partir de esta interacción (ec. 7.1) se define la ESPE de una órbita con momento angular  $j$  e isospín  $\tau$  como la energía de partícula independiente 'desnuda' ( $\epsilon^\tau(j)$ ) más los efectos de la interacción monopolar de otras órbitas  $j', j'', \dots$  ocupadas sobre el nivel  $(j, \tau)$  [14]:

$$\text{ESPE}^\tau(j) = \epsilon^\tau(j) + \sum_{j'} \frac{1}{2} (V_{jj'}^{T=0} + V_{jj'}^{T=1}) n_{\tau' \neq \tau}(j') \quad (7.2)$$

donde  $\epsilon^\tau(j)$  habitualmente se ajustan a los espectros de excitación de los núcleos impares más cercanos a los núcleos doblemente mágicos y  $n_{\tau'}(j')$  es el valor esperado del número de partículas en dicha órbita.

Como ejemplo de un cálculo realista de las energías de partícula independiente efectivas, en la figura 7.1 se muestra la evolución de las ESPE's en función del número de neutrones para distintos elementos de la capa  $fp$  con la interacción GXPF1 (figura 1 de la referencia [24]). Aquí se aprecia que los niveles están separados en función de los números cuánticos  $(n, l, j)$ . Para los núcleos Ca, Ti, Cr y Fe se observa un comportamiento cualitativamente

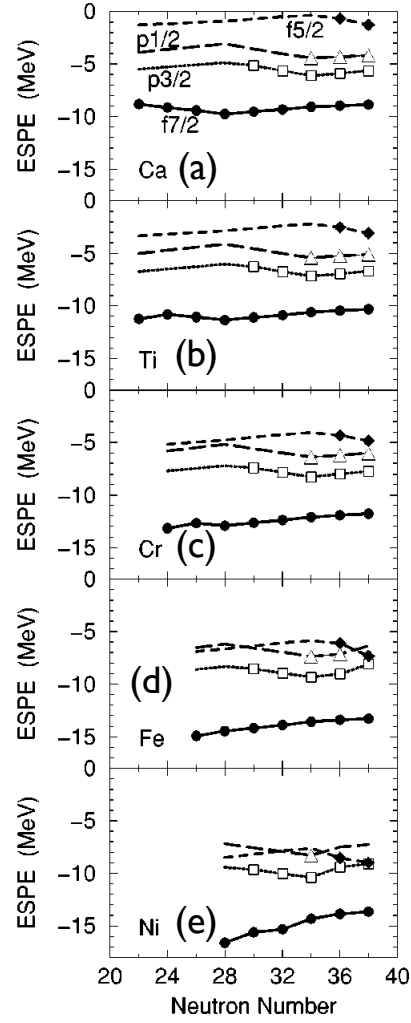


Figura 7.1: Energías de partícula independiente efectivas de neutrones (ES-PE's) en función del número de neutrones para los isótopos del (a) calcio, (b) titanio, (c) cromo, (d) hierro y (e) níquel, calculadas con la interacción GXPF1. Los símbolos indican que la órbita está ocupada por al menos una partícula en la configuración normal de llenado. La figura está extraída de la referencia [24]

similar de las órbitas  $\nu f_{7/2}$ ,  $\nu p_{3/2}$ ,  $\nu p_{1/2}$  y  $\nu f_{5/2}$  en función del número de neutrones. Además, vemos que la órbita  $\nu f_{7/2}$  está separada de la siguiente más cercana  $\nu p_{3/2}$  por un *gap* de energía significativo en todos los núcleos considerados demostrando que  $N = 28$  es un buen número mágico. También se observa la existencia de un *gap* entre los niveles  $\nu p_{3/2}$  y  $\nu p_{1/2}$  en los isótopos del Ca, Ti, Cr y Fe, que, como se verá más adelante, es un indicio del cierre de capas en  $N = 32$ . Sin embargo, la diferencia más notable se ve en la diferencia energética entre las órbitas  $\nu p_{1/2}$  y  $\nu f_{5/2}$ , que decrece gradualmente a medida que se aumenta el número de protones. Así, en los isótopos del calcio se aprecia una diferencia considerable entre dichos niveles mientras que para los isótopos del níquel la capa  $\nu f_{5/2}$  está incluso por debajo de la órbita  $\nu p_{1/2}$ . Por tanto, este comportamiento se podrá interpretar como un indicio de un cierre de capas para  $N = 34$  en el núcleo  $^{54}\text{Ca}$  que se va degradando a medida que se aumenta el número de protones.

Se han propuesto distintos orígenes de la deriva de las energías de partícula independiente efectivas. Por un lado, está la parte monopolar de la propia interacción de espín-órbita, que podría depender del número de protones y neutrones. Sin embargo, la deriva monopolar se explica de manera más directa si se asume que, a partir de la interacción nuclear, se puede extraer un término central de la forma:

$$V_{\tau\sigma} = (\tau \cdot \tau)(\sigma \cdot \sigma)f_{\tau\sigma}(r) \quad (7.3)$$

donde  $(\tau, \sigma)$  son el isospín y el espín respectivamente.

Con los signos adecuados se puede obtener una interacción monopolar protón-neutrón fuertemente atractiva entre niveles con el mismo valor del momento angular orbital ( $l$ ) y distinto valor del momento angular total ( $j_> = l + 1/2$ ,  $j_< = l - 1/2$ ) [14]. Esto es precisamente lo que ocurre en el ejemplo anterior (fig. 7.1), donde a medida que se iba llenando de protones la capa  $\pi f_{7/2}$  ( $j = 2 + 1/2$ ), la energía de la capa  $\nu f_{5/2}$  ( $j = 2 - 1/2$ ) va decreciendo.

Además de este término central, se ha demostrado que las ESPE's son sensibles a la parte monopolar de un término tensor que tiene en cuenta la atracción o repulsión entre nucleones situados en órbitas con distintos momentos angulares orbitales ( $l, l'$ ) [16].

En este capítulo se van a estudiar los posibles cierres de capas desde un punto de vista diferente al análisis que se ha hecho anteriormente. Para ello, se aplican los métodos más allá de campo medio que se han descrito en capítulos precedentes. Las ventajas que tienen estos métodos son, por un la-

do, que la interacción no está ajustada a ninguna región particular de la tabla de núcleos ni el cálculo depende del espacio de valencia empleado. Por otro lado, los efectos colectivos, como la deformación o las fluctuaciones de forma, están incluidos en el cálculo de manera natural. Por contra, los principales inconvenientes provienen de la incapacidad de obtener adecuadamente excitaciones no colectivas o los momentos de inercia, como se ha comentado en el capítulo anterior. Sin embargo, como se verá a continuación, la descripción de los núcleos mediante las funciones de onda dadas por el método GCM con funciones de onda intrínsecas VAP proyectadas a buen número de partículas y momento angular reproducen cualitativamente los datos experimentales.

## 7.1. Estudio de los cierres de capas $N = 32$ , $N = 34$ en núcleos ricos en neutrones

Como se ha adelantado en la sección anterior, recientemente se han estudiado tanto teórica como experimentalmente los posibles cierres de capas en  $N = 32$  y/o  $N = 34$  en los núcleos ricos en neutrones. Desde el punto de vista experimental se han medido los valores de las energías del primer estado excitado  $2^+$  en las cadenas isotópicas del calcio [7], titanio [8, 9, 10, 11] y cromo [12, 13]. Asimismo, se han medido las probabilidades de transición cuadrupolar reducidas ( $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ ) en los isótopos del titanio [22] y del cromo [23] obteniéndose unos resultados que corroboran la presencia de un cierre de capas en  $N = 32$ .

Por el lado teórico existen cálculos del modelo de capas con dos interacciones efectivas diferentes que han demostrado ser capaces de describir adecuadamente propiedades de los núcleos de la capa  $pf$ . La primera de ellas es la GXPF1 [24], a partir de la cual se extraen las ESPE's que analizamos en la figura (fig. 7.1), mientras que la segunda es la interacción KB3G [25]. En la figura (fig. 7.2, extraída de la referencia [8]) se muestran las energías de excitación del primer estado  $2^+$  calculadas con el modelo de capas para los isótopos del calcio, titanio y cromo. En ella se observan claramente los cierres de capas en  $N = 28$  y  $N = 32$  en los datos experimentales ya que se aprecia un aumento significativo de la energía de excitación. Dichas energías son más pequeñas a medida que se aumenta el número de protones debido a que, al llenar la capa  $\pi f_{7/2}$ , dichos protones contribuyen a aumentar la colectividad del núcleo. Además, vemos que los cálculos están de acuerdo con la tendencia de los datos experimentales hasta  $N = 32$ . Sin embargo, la interacción GXPF1 predice un cierre en  $N = 34$  en el isótopo  $^{54}\text{Ca}$  y, en menor medida, en el  $^{56}\text{Ti}$ , mientras que en el resultado de la interacción KB3G no se observa

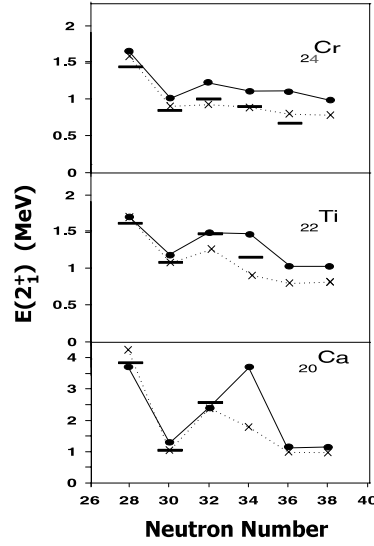


Figura 7.2: Energías de excitación experimentales (líneas) y calculadas con el modelo de capas con la interacción GXPF1 (puntos) y KB3G (cruces) para los isótopos del calcio, cromo y titanio. La figura está extraída de la referencia [8]

tal pauta. Este comportamiento se debe a que en el  $^{54}\text{Ca}$ , la separación entre los niveles de partícula independiente efectivos  $\nu p_{3/2}$  y  $\nu f_{5/2}$  es considerable (figura (7.1)). Sin embargo, a partir de los resultados experimentales del  $^{56}\text{Ti}$  y  $^{58}\text{Cr}$  no se observa ningún indicio de dicho cierre, aunque del núcleo  $^{54}\text{Ca}$  todavía no se tienen datos de las energías de excitación.

En la figura (fig. 7.3, extraída de la referencia [26]) se muestran las probabilidades de transición para los isótopos del titanio. Aquí se observa que los datos experimentales tienen un comportamiento de zig-zag, siendo las probabilidades menores en los núcleos con  $N = 28$  y  $N = 32$  y mayores en los núcleos con  $N = 30$  y  $N = 34$  [22]. Los resultados del modelo de capas no reproducen tal comportamiento con ninguna de las dos interacciones efectivas si se usan las cargas efectivas usuales (figura 7.3(a)), mientras que si aumenta la carga efectiva de neutrones y se disminuye la de protones se recupera la tendencia de los datos experimentales, excepto con la interacción GXPF1 en  $N = 34$ .

A continuación vamos a estudiar el problema del cierre de capas en  $N = 32$  y/o  $34$  desde el punto de vista de las teorías más allá de campo medio [27]. En primer lugar analizamos las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas, obtenidas a partir de un cálculo



### 7.1. Estudio de los cierres de capas $N = 32$ , $N = 34$ en núcleos ricos en neutrones

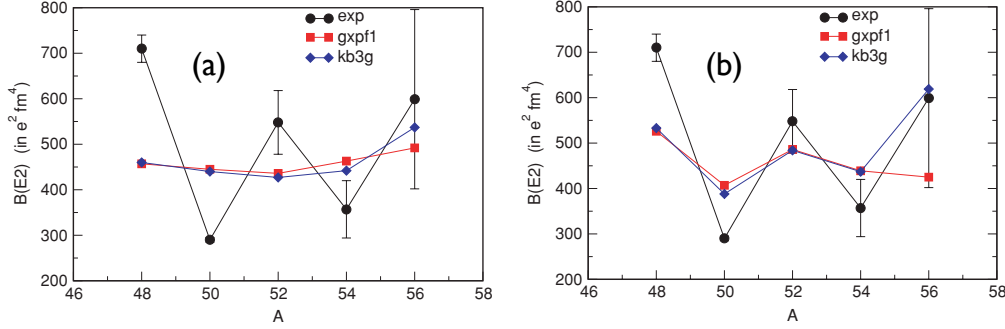


Figura 7.3: Probabilidades de transición reducidas  $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  experimentales (puntos) y calculadas con el modelo de capas con la interacción GXPF1 (cuadrados rojos) y KB3G (diamantes azules) para los isótopos del calcio, cromo y titanio, con cargas efectivas (a)  $q_\pi = 1.5e$ ,  $q_\nu = 0.5e$  y (b)  $q_\pi = 1.15e$ ,  $q_\nu = 0.8e$ . La figura está extraída de la referencia [26]

VAP y definidas como función de la deformación cuadrupolar axial (ec. 5.37):

$$e_{\text{VAP}}^{NZ}(q_{20}) = \frac{\langle \text{VAP}(q_{20}) | \hat{H} P^N P^Z | \text{VAP}(q_{20}) \rangle}{\langle \text{VAP}(q_{20}) | P^N P^Z | \text{VAP}(q_{20}) \rangle} \quad (7.4)$$

Como vimos en los capítulos anteriores, este es el primer paso para obtener las funciones de onda colectivas que describan finalmente el núcleo. No obstante, a partir del análisis de dichas curvas, mostradas en la figura (fig. 7.4), se pueden aspectos relevantes para entender los resultados dados por el generador de coordenadas. En primer lugar, observamos que todos los isótopos del calcio tienen unas superficies de energía potencial más estrechas y, a medida que se aumenta el número de protones, las curvas se van haciendo más anchas indicando un aumento de la colectividad al añadir partículas fuera del cierre de capas en  $Z = 20$ . Otra prueba clara de la robustez de este cierre es que las superficies de energía potencial de los núcleos de calcio tienen todos el mínimo con deformación cuadrupolar  $q_{20} = 0$  (b). Para los isótopos del titanio, y más aún para los del cromo, se observa el desarrollo de mínimos deformados. Si ahora analizamos el comportamiento de las curvas en función del número de neutrones encontramos que hay una semejanza entre las curvas con  $N = 28, 32$  (especialmente para los núcleos  $^{48,52}\text{Ca}$ , y  $^{50,54}\text{Ti}$ ). Éstas se comportan de manera diferente a las superficies correspondientes a los isótopos con  $N = 30$  y  $N = 34$ , con lo que se podría interpretar como un primer indicio de que  $N = 32$  puede ser un sub-cierre de capa mientras que  $N = 34$  no lo sería.

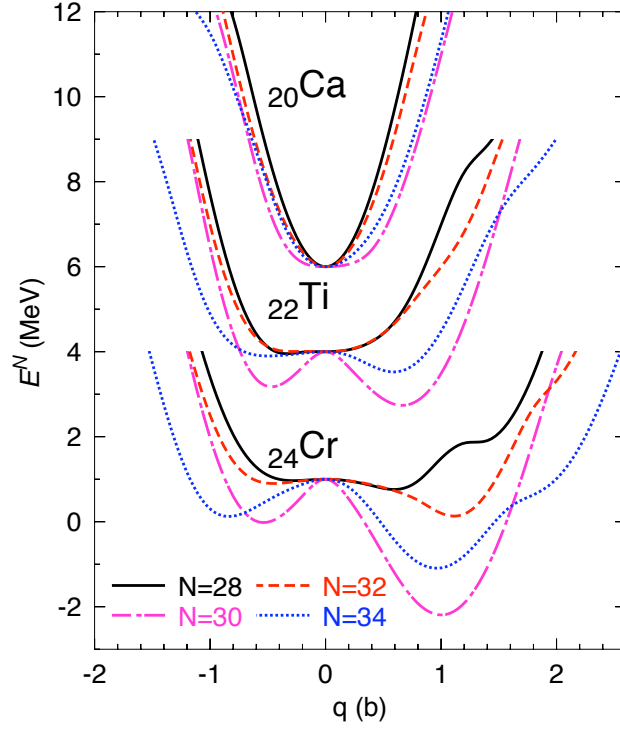


Figura 7.4: Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas obtenidas con funciones intrínsecas VAP como función del momento cuadrupolar axial para los isótopos del calcio (parte superior), titanio (parte central) y cromo (parte inferior). Las curvas están normalizadas para tener el mismo valor de la energía en  $q_{20} = 0$  (b) y se han desplazado 1, 4 y 6 MeV las superficies del calcio, titanio y cromo respectivamente para una mejor visualización.

A continuación incluimos las correlaciones provenientes tanto de la restauración de la simetría rotacional como de la mezcla de funciones de onda con distintos valores de deformación cuadrupolar, siguiendo el método propuesto en el capítulo 3, donde las energías  $E^{NZ;J;\sigma}$  y las funciones de onda colectivas  $G^{NZ;J;\sigma}(q_{20})$  se hallan resolviendo la ecuación de Hill-Wheeler en la base natural  $\langle |k^{NZ;J} \rangle$  (ecs. 6.49,6.51):

$$\sum_{k', n_{k'}^{NZ;J} \neq 0} \langle k^{NZ;J} | \hat{H} | k'^{NZ;J} \rangle g_{k'}^{NZ;J;\sigma} = E^{NZ;J;\sigma} g_k^{NZ;J;\sigma} \quad (7.5)$$

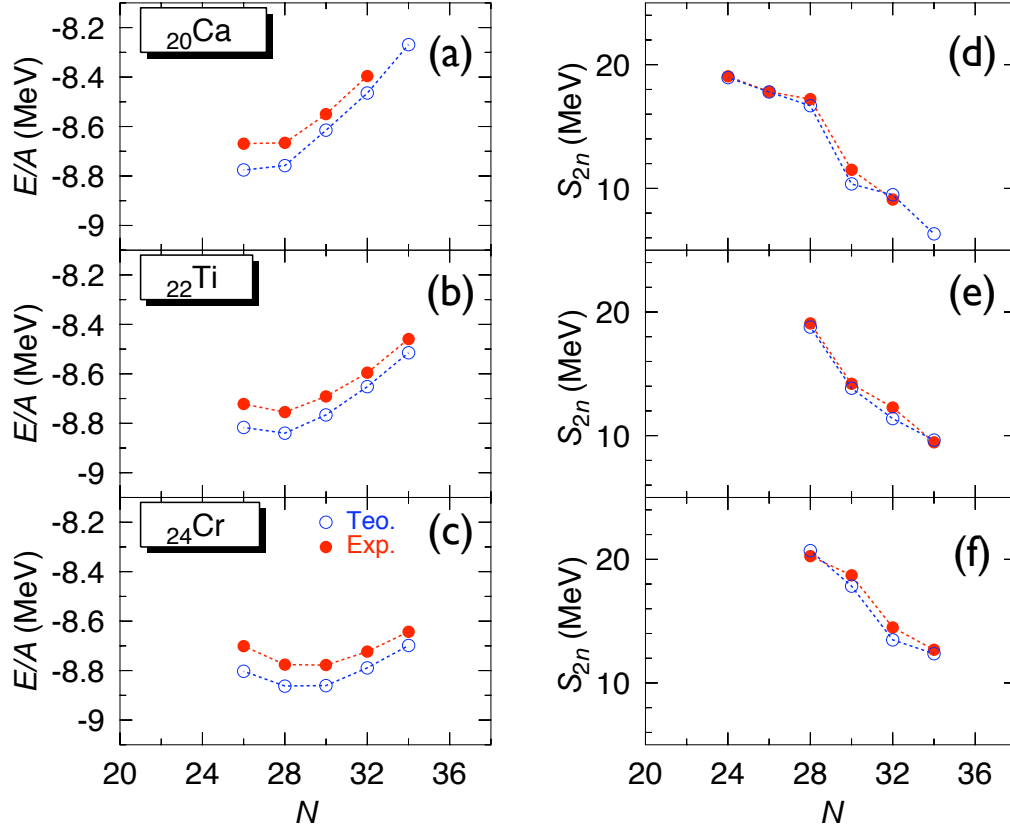


Figura 7.5: Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del (a)-(d) calcio, (b)-(e) titanio y (c)-(f) cromo. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28]

$$G^{NZ;J;\sigma}(q_{20}) = \sum_k g_k^{NZ;J;\sigma} u_k^{NZ;J}(q_{20}) \quad (7.6)$$

donde las funciones  $u_k^{NZ;J}(q_{20})$  son los autovalores de la matriz de solapes de la norma (ec. 6.47).

En primer lugar analizamos las propiedades de los estados fundamentales ( $J = 0, \sigma = 0$ ) hallados con el generador de coordenadas. En la figura (fig. 7.5) comparamos los resultados teóricos y experimentales de las energías de ligadura por nucleón para los núcleos estudiados. Vemos que los cálculos reproducen cualitativamente los datos experimentales, aunque se observa un exceso de energía de ligadura de alrededor de 100 KeV/A en todos ellos. Este efecto

se debe principalmente a que la fuerza está ajustada a propiedades globales en toda la tabla de núcleos y no a esta región específica. Además, en el ajuste tampoco se tienen en cuenta las correlaciones más allá del campo medio con lo que este exceso es predecible. Sin embargo, en las energías de separación de dos neutrones, definidas como la diferencia entre las energías de ligadura de los isótopos con  $N - 2$  y  $N$  neutrones ( $S_{2n}(N) = BE(N) - BE(N - 2)$ ), este efecto se cancela. En el panel derecho de la figura (fig. 7.5) se aprecia que en este caso el acuerdo entre los cálculos y los datos experimentales es excelente.

Para analizar los posibles cierres de capas en  $N = 32, 34$  calculamos las energías de excitación de los primeros estados  $2^+$  dentro del marco del generador de coordenadas ( $J = 2, \sigma = 0$ ). En la figura (fig. 7.6) se representan dichas energías para los distintos isótopos estudiados junto con los datos experimentales. En primer lugar observamos que las energías de excitación en promedio son mayores en los núcleos de calcio que en los de titanio y éstas a su vez en los núcleos de cromo. Este hecho indica el aumento de la colectividad a medida que se colocan protones fuera del cierre de capas  $Z = 20$  y que ya habíamos inferido de la figura (fig. 7.4). Sin embargo, los efectos más significativos y relevantes se observan estudiando el comportamiento de las energías de excitación en función del número de neutrones. En la figura (fig. 7.6) se muestra que los resultados teóricos reproducen muy bien la tendencia de los datos experimentales. El desacuerdo cuantitativo entre los cálculos y los resultados medidos se debe en parte a la ausencia de efectos triaxiales en el modelo, como vimos en el capítulo anterior. Estos efectos se estiman más importantes en núcleos esféricos que en núcleos bien deformados. Aunque no sea muy relevante para las conclusiones extraídas a partir de los cálculos, se puede corregir aproximadamente la ausencia del grado de libertad triaxial multiplicando los resultados por un factor [29]. En este caso, si efectuamos tal corrección, con unos factores de 0.58 (Ca), 0.69 (Ti) y 0.76 (Cr) obtenemos también un acuerdo cuantitativo con los datos experimentales excelente. En relación con los posibles cierres de capas en  $N = 32, 34$  vemos que los cálculos están de acuerdo con un cierre en  $N = 32$  mientras que para  $N = 34$  no se halla ninguna prueba de tal cierre. Además, con respecto al núcleo  $^{54}\text{Ca}$ , los resultados de los métodos más allá de campo medio que se presentan aquí concuerdan con las predicciones de los cálculos del modelo de capas con la interacción KB3G y no con los de la interacción GXPF1 (fig. 7.2) ni con su versión modificada GXPF1A [30].

Por último, estudiamos las  $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  obtenidas con las funciones de onda halladas a partir del método del generador de coordenadas (ec.

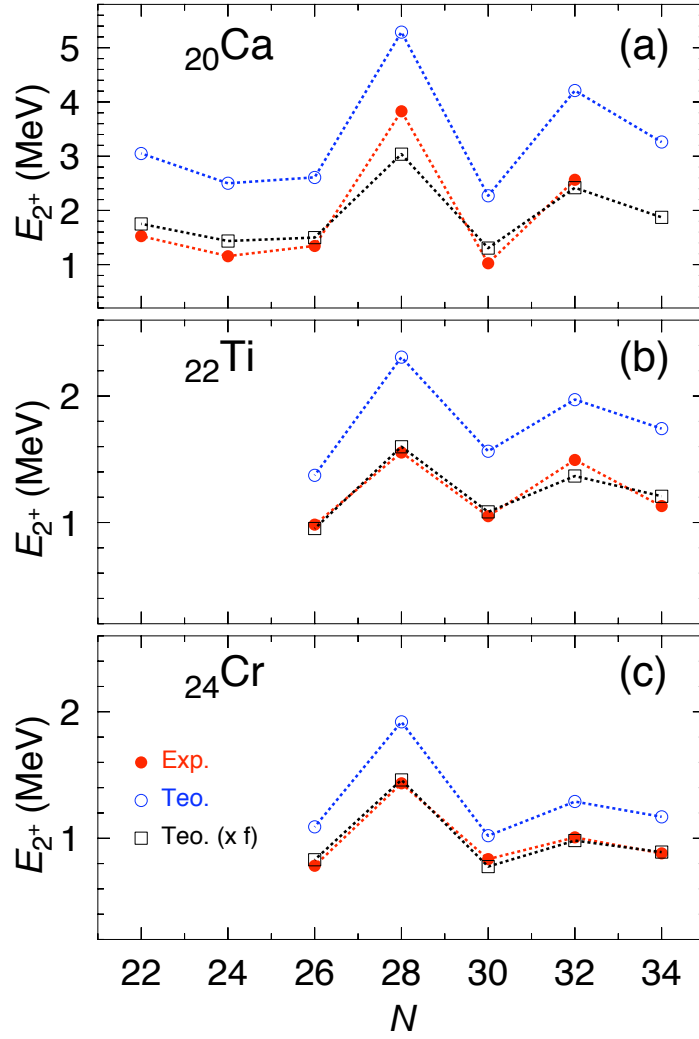


Figura 7.6: Energías de excitación del primer estado  $2^+$  experimental (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas para los isótopos del (a) Ca, (b) Ti y (c) Cr. Los círculos azules se corresponden con los resultados obtenidos a partir de los cálculos mientras que los cuadrados negros se obtienen multiplicando dichos resultados por un factor corrector (véase el texto para más detalles).

C.37):

$$B(E2, J_1 = 0, \sigma_1 = 0 \rightarrow J_2 = 2, \sigma_2 = 0) = \frac{1}{5} |\langle 0_0 || \hat{M}_2^{\text{ele}} || 2_0 \rangle|^2 \quad (7.7)$$

donde  $\langle 0_0 || \hat{M}_2^{\text{ele}} || 2_0 \rangle$  es el elemento de matriz reducido entre los estados del generador de coordenadas del operador correspondiente a la transición cuadrupolar eléctrica  $\hat{M}_2^{\text{ele}}$ . Las expresiones para calcular dichas probabilidades de transición reducidas se detallan en el apéndice C.

En la figura 7.7 se representan los valores teóricos y experimentales de las  $B(E2)$ 's para los núcleos de Ca, Ti y Cr estudiados. Aquí de nuevo se observa que la colectividad es mayor en los isótopos del cromo que en los del titanio y calcio ya que se obtienen valores más altos para las probabilidades de transición. Con respecto a la dependencia con el número de neutrones vemos que los resultados teóricos reproducen la tendencia de los resultados experimentales, especialmente en los núcleos más ligeros. Sin embargo, la figura (fig. 7.7) muestra que los valores teóricos son mayores que los datos empíricos. Probablemente este efecto se deba tanto a la ausencia de los grados de libertad triaxiales como a la tendencia de la interacción de Gogny (y de las de Skyrme también) a favorecer la aparición de deformación. Además, es interesante comentar que el comportamiento zigzagueante de las  $B(E2)$ 's en los isótopos del titanio se reproduce cualitativamente en los cálculos más allá de campo medio sin necesidad de emplear cargas efectivas ya que se trabaja con grandes espacios de configuración. Como se mencionó anteriormente (fig. 7.3), este comportamiento de las probabilidades de transición en los isótopos del titanio sólo se puede reproducir en los cálculos del modelo de capas reajustando las cargas efectivas que se emplean habitualmente [26].

Para concluir, en esta sección se ha presentado la aplicación del método del generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas VAP proyectadas a buen número de partículas y momento angular al estudio de los posibles cierres de capas en  $N = 32, 34$  en los núcleos ricos en neutrones. Del análisis de los resultados se ha podido determinar que el método propuesto en los capítulos precedentes permite explicar cualitativamente los datos experimentales, tanto las propiedades de los estados fundamentales como las energías de excitación y probabilidades de transición cuadrupolar de los primeros estados excitados  $2^+$ . Todo ello obtenido con una fuerza (Gogny) cuyos parámetros no fueron ajustados para esta región específica de la tabla de núcleos. Por último, los cálculos teóricos confirman la existencia de un cierre en  $N = 32$  mientras que predicen la inexistencia de tal cierre en  $N = 34$ .

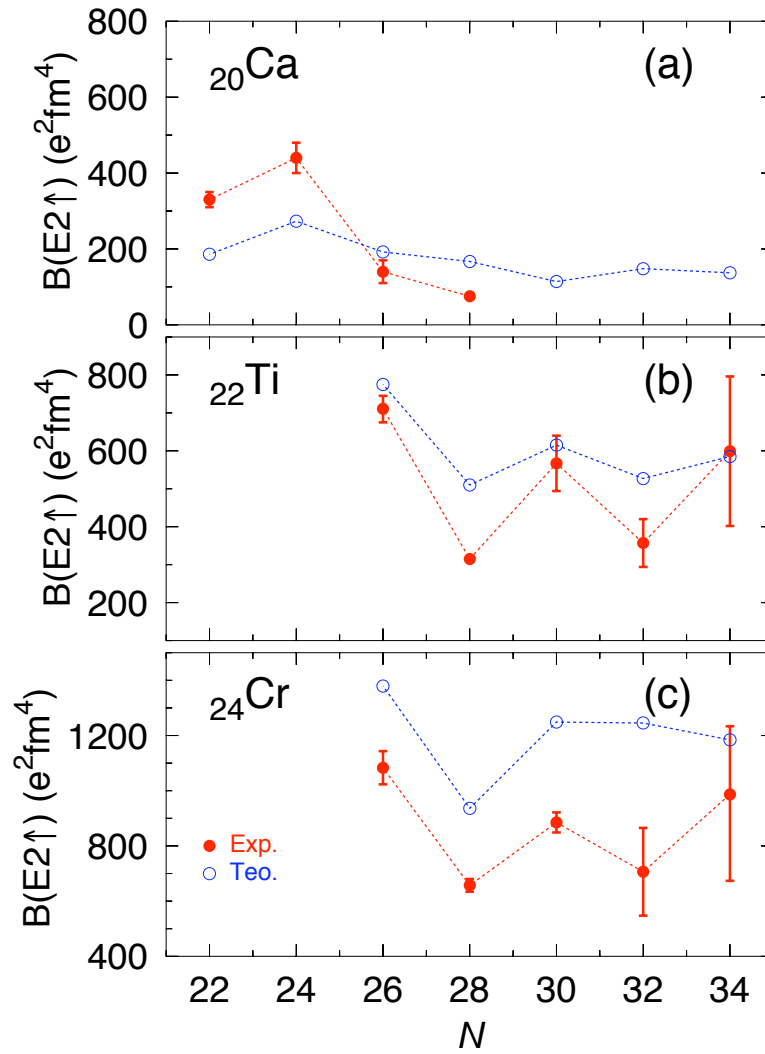


Figura 7.7: Probabilidades de transición reducidas para los isótopos de calcio, titanio y cromo. Los datos experimentales están tomados de las referencias [22, 23].

## 7.2. Estudio del cierre de capas $N = 40$ en los isótopos del Cromo

En la sección anterior hemos comprobado que los métodos más allá de campo medio con interacciones fenomenológicas efectivas consiguen explicar y predecir cualitativamente los datos experimentales que confirman o niegan la existencia de cierres de capas para determinados núcleos. A continuación se extenderá el cálculo a isótopos del cromo más pesados para estudiar el posible cierre en  $N = 40$ . Dicho valor corresponde al llenado completo de las capas de oscilador hasta  $N_{\text{osc}} = 3$ . En el valle de la estabilidad, la interacción de espín-órbita hace que la órbita  $g_{9/2}$ , correspondiente a la capa de oscilador  $N_{\text{osc}} = 4$ , baje en energía reduciéndose la distancia energética entre los niveles  $pf$  y haciendo que  $N = 50$  sea un número mágico en lugar de  $N = 40$ . Sin embargo, en los núcleos exóticos ricos en neutrones podría darse que dicha reducción fuera menor debido a un debilitamiento de la interacción de espín-órbita. La superficie de estos núcleos es más difusa y, por tanto, se espera que el término de espín-órbita sea menor haciendo plausible un cierre de capas en  $N = 40$ . Además, el hecho de que las paridades de los niveles de la capa  $pf$  y la órbita  $g_{9/2}$  sean distintas hace que las excitaciones que preservan la paridad, como las cuadrupolares, estén inhibidas. De hecho, se ha observado experimentalmente un aumento de la energía de excitación del primer estado  $2^+$  y una disminución de la probabilidades de transición  $B(E2)$  en el núcleo  $^{68}\text{Ni}_{40}$  en relación con el resto de la cadena isotópica, evidenciando un posible cierre en  $N = 40$  [31].

Por otro lado, los niveles de la órbita  $g_{9/2}$  decrecen rápidamente en energía en función de la deformación cuadrupolar, con lo que dichos estados intrusos pueden pasar a estar ocupados y el *gap* en  $N = 40$  puede desaparecer. En el caso de los isótopos de cromo existen indicios experimentales de la erosión de este cierre de capa de oscilador aunque las propiedades espectroscópicas del núcleo  $^{62}\text{Cr}_{40}$  todavía no se han medido. Por un lado, las energías de excitación ( $E(2^+)$ ) decrecen de manera continua desde el sub-cierre en  $N = 32$  hasta  $N = 38$  [32] a lo largo de la cadena isotópica. Además, las energías de excitación de los estados  $9/2^+$  de los núcleos impares  $^{55-59}\text{Cr}$  decrece a medida que aumenta el número de neutrones indicando que el orbital  $\nu g_{9/2}$  juega un papel importante en estos isótopos. Por último, los cálculos del modelo de capas con el espacio de configuración  $pf$  son incapaces de reproducir correctamente los niveles en el  $^{59}\text{Cr}$  [33] ni la tendencia de las energías de excitación ( $E(2^+)$ ) cerca de  $N = 40$  [32]. La extensión del cálculo a los niveles  $\nu g_{9/2}, \nu d_{5/2}$ , aunque restringida por razones computacionales, mejoran leve-



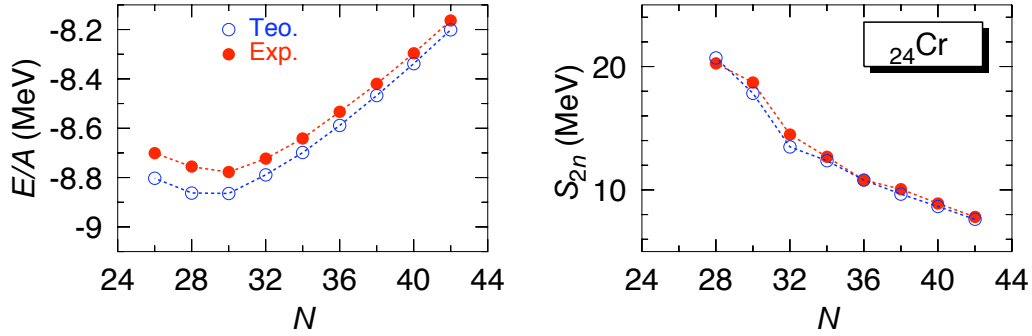


Figura 7.8: Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del cromo. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28]

mente la sistemática de las energías  $E(2^+)$  y los resultados son compatibles con la aparición de deformación cuadrupolar y la erosión definitiva del cierre en  $N = 40$  para los isótopos del cromo [32].

A continuación aplicamos el método más allá de campo medio propuesto en esta tesis en el estudio de las propiedades de los núcleos de cromo en las proximidades de  $N = 40$ . En la figura (fig. 7.8) se muestran las energías de ligadura por nucleón y las energías de separación de dos neutrones, tanto teóricas como experimentales [28], que representan propiedades del estado fundamental. En primer lugar, observamos un acuerdo muy bueno entre los datos experimentales y los cálculos. Vemos de nuevo que existe un exceso de energía de ligadura en los resultados teóricos que disminuye a medida que aumenta el número de neutrones, aunque la tendencia de los datos experimentales se reproduce perfectamente. Además, la energía de ligadura por partícula tiene un mínimo en  $N = 30$  y crece de manera continua con el número de neutrones ya que nos aproximamos a la línea de goteo de neutrones. Lo mismo sucede con el descenso de la energía de separación de dos neutrones al aumentar la masa, ya que el último isótopo par-par ligado con mayor número de neutrones es el  $^{66}\text{Cr}_{42}$  y más allá la  $S_{2n}$  se hace negativa.

Como vimos en la sección anterior, los observables relevantes para determinar la existencia de cierres de capas son la energía del primer estado excitado  $2^+$  y las probabilidades de transición reducidas  $B(E2)$  entre dicho estado y el fundamental. Estas cantidades están representadas en la figura

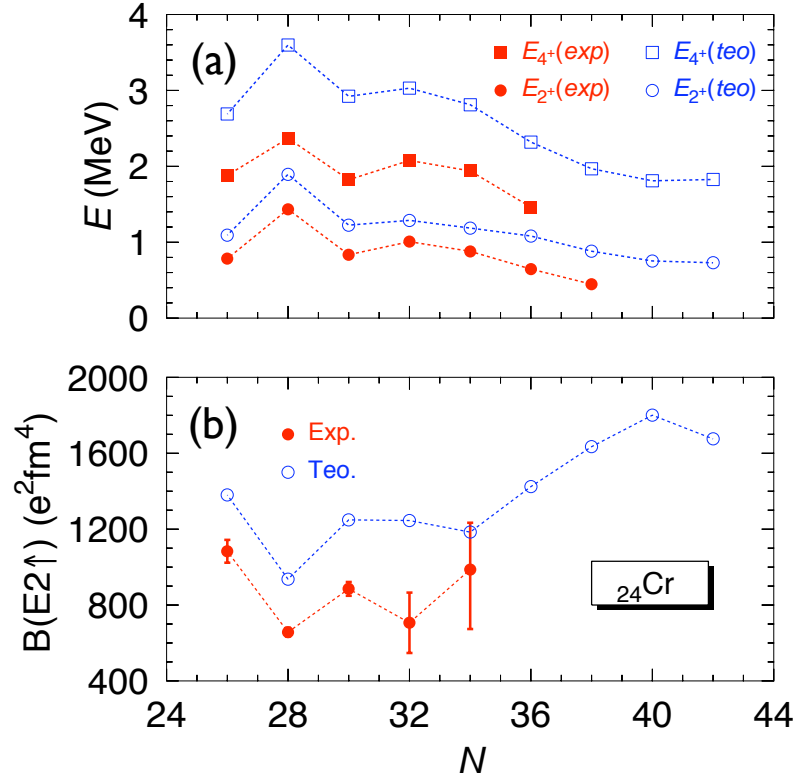


Figura 7.9: (a) Energías de excitación de los primeros estados  $2^+$ ,  $4^+$  y (b) Probabilidades de transición reducidas experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas (puntos azules) para los isótopos del Cr. Los datos experimentales están tomados de las referencias [12, 13, 32, 23, 34]

(fig. 7.9). Si analizamos la sistemática de las energías de excitación tanto del primer estado excitado  $2^+$  como del  $4^+$  vemos de nuevo los picos correspondientes a los cierres en  $N = 28$  y  $N = 32$ . A partir de este núcleo la energía decrece de manera continua tanto experimentalmente como en los resultados teóricos, que reproducen la tendencia de las mediciones satisfactoriamente de los núcleos que hasta la fecha son accesibles experimentalmente. En la figura (fig. 7.9)(a) vemos que los cálculos predicen que en  $N = 40$  ( $^{64}\text{Cr}$ ) no se produce ningún cierre de capas. Con respecto a las probabilidades de transición los datos experimentales se reducen a los núcleos con  $N \leq 34$  discutidos en la sección anterior. Para los isótopos más pesados los cálculos predicen un crecimiento lineal de las probabilidades de transición que revelan un aumento de la colectividad con el número de neutrones. Para el núcleo  $^{64}\text{Cr}_{40}$  se obtiene un máximo en las probabilidades de transición, contrariamente a lo que se

observa experimentalmente en el núcleo  $^{68}\text{Ni}_{40}$  donde se tenía un cierre bien establecido en  $N = 40$  [31].

La influencia de la deformación y la influencia de las correlaciones cuadrupolares se puede estudiar representando las funciones de onda colectivas para cada estado con momento angular  $(J, \sigma)$ . En la figura (fig. 7.10) se muestran los resultados para la cadena isotópica del cromo. En ella se pueden apreciar también las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular  $J = 0, 2, 4$ . Como es de esperar, a medida que crece el número de neutrones dichas curvas de energía se ensanchan. Además, vemos que las funciones de onda colectivas tienen su máximos situados aproximadamente en los mínimos de los respectivos pozos de potencial. Notamos que las funciones de onda correspondientes a los estados con  $J = 0$  son esencialmente proladas aunque con bastante mezcla en los núcleos con  $N = 28, 32, 34, 36$  mientras que las correspondientes a  $J = 2, 4$  son claramente proladas excepto en los isótopos  $^{52,56}\text{Cr}$  que, en  $J = 2$  tienen cierta mezcla con la parte oblada. La posición de los máximos de las funciones de onda se van desplazando hacia valores positivos más altos del momento cuadrupolar cuando aumenta el número de neutrones en el sistema. Por tanto, los resultados teóricos indican que los isótopos del cromo tienen deformación prolada que se acentúa a medida que aumenta el espín de los estados. De la figura (fig. 7.10) además podemos apreciar que el isótopo  $^{64}\text{Cr}_{40}$  es un núcleo bien deformado y no presenta indicios de cierre de capas en  $N = 40$ .

Por último, vamos a analizar la influencia de los niveles intrusos en la capa de oscilador  $N_{osc} = 3$ . En la figura (fig. 7.11) se representan las energías de partícula independiente de protones (izquierda) y neutrones (derecha) en función de la deformación cuadrupolar axial ( $q_{20}$ ), calculadas en la aproximación de HFB para el núcleo  $^{64}\text{Cr}_{40}$ . En el caso de los protones, vemos que aparece un *gap* de energía significativo en la parte prolada ( $0 \leq q_{20} \leq 4$  (b)) producido entre los estados de la capa  $\pi f_{7/2}$ , estando el nivel de Fermi en mitad de dicho *gap*. Este comportamiento es muy similar al que se vio en la parte de protones del núcleo  $^{54}\text{Cr}$  (fig. 5.12). Sin embargo, la parte más relevante en el análisis de los posibles cierres de capas está en el espectro de neutrones. Aquí se aprecia que el *gap* en  $N = 40$  está bastante localizado alrededor de la deformación esférica ( $q_{20} = 0$  (b)) y desaparece a medida que aumenta la deformación, tanto oblada como prolada, debido al rápido descenso de los niveles provenientes de la capa  $\nu g_{9/2}$  y el ascenso de los correspondientes a las capas  $\nu p_{1/2}$  y  $\nu f_{5/2}$ . El nivel de Fermi de neutrones indica que dichas órbitas intrusas están ya ocupadas para una deformación relativamente pequeña. Por otro lado, vemos que en el intervalo de deformaciones

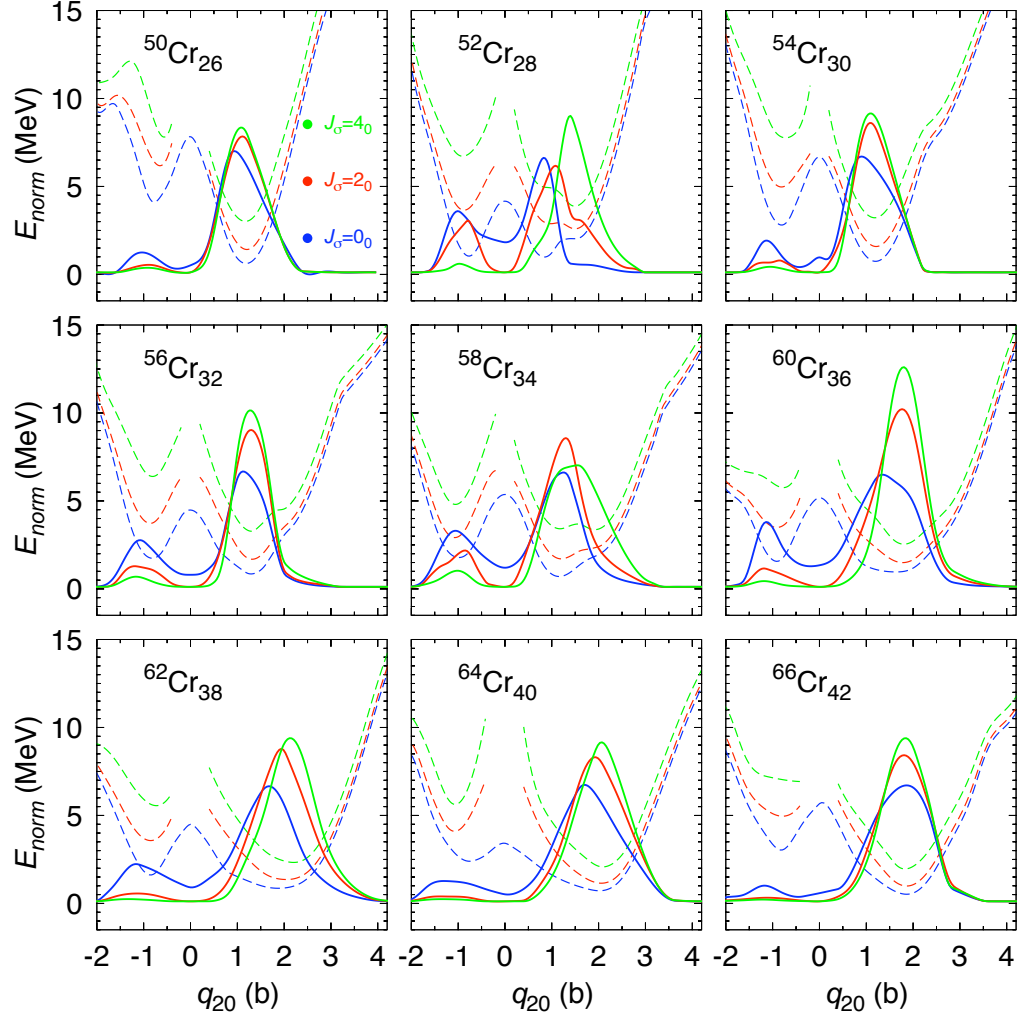


Figura 7.10: Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas) y funciones de onda colectivas (líneas continuas) de los estados ( $J = 0, \sigma = 0$  (azul)), ( $J = 2, \sigma = 0$  (rojo)) y ( $J = 4, \sigma = 0$  (verde)) para los núcleos  $^{50-66}\text{Cr}$ . Las energías están normalizadas al valor del estado fundamental ( $J = 0, \sigma = 0$ ) de cada núcleo.

$0.5 \leq q_{20} \leq 3$  (b) se obtiene una alta densidad de niveles alrededor de la energía de Fermi. Dichos niveles provienen de las órbitas intrusas  $\nu g_{9/2}$ , que empiezan a poblarse, así como del nivel  $\nu f_{5/2}$  que empieza a despoblarse. Es precisamente en este intervalo de deformaciones donde se obtienen los mínimos (máximos) de las superficies de energía potencial (funciones de onda colectivas) mostradas en la figura (fig. 7.10) y, por tanto, la región más relevante del espectro de partícula independiente. Con respecto a la órbita  $\nu d_{5/2}$  observamos que se acerca al nivel de Fermi sólo a una deformación  $q_{20} \geq 3$  (b), con lo que su influencia es pequeña. Con este análisis se demuestra, por un lado, que el *gap* esférico en  $N = 40$  no juega un papel significativo en este núcleo, corroborando la inexistencia de un cierre de capas. Por otro lado, confirma la importancia de los niveles intrusos que vienen de la órbita  $\nu g_{9/2}$  y la necesidad de incluir dichas órbitas en el espacio de valencia en los cálculos del modelo de capas que traten de describir esta región [32].

## 7.3. Estudio del cierre de capas $N = 28$ en los isótopos del Silicio

El número mágico 28 que aparece en el valle de la estabilidad es el primero producido por el término de espín-órbita de la interacción de partícula independiente nuclear y se debe a la apertura de un *gap* entre el nivel  $f_{7/2}$  y el resto de las órbitas  $pf$  correspondientes a  $N_{\text{osc}} = 3$ . La posible erosión del cierre de capas en  $N = 28$  en núcleos ricos en neutrones ha sido ampliamente estudiada últimamente desde el núcleo doblemente mágico  $^{48}\text{Ca}$  hasta el  $^{40}\text{Mg}$ , que está en la línea de goteo de neutrones. El caso del núcleo  $^{42}_{14}\text{Si}_{28}$  ha sido particularmente controvertido ya que experimentalmente se infiere un cierre de sub-capa en los protones ( $Z = 14$ ) que, añadido a un potencial cierre en  $N = 28$ , conferiría un carácter de núcleo doblemente mágico a este isótopo [36]. Sin embargo, tanto la corta vida media de la desintegración beta del estado fundamental [37] como la recientemente medida energía del primer estado excitado ( $E(2^+)$ ) [6] demuestran que el cierre en  $N = 28$  no existe en el núcleo  $^{42}_{14}\text{Si}$ .

Desde el punto de vista del modelo de capas este colapso se debe a la compresión de los niveles de protones en la capa  $sd$  y de los niveles de neutrones en la capa  $pf$  debida a la parte monopolar de la fuerza tensor [6, 38, 16]. No obstante, en los cálculos realizados empleando teorías de campo medio [39, 40, 41, 42], así como en los cálculos efectuados con un método más allá de campo medio similar al que se presenta aquí, pero sin proyección a

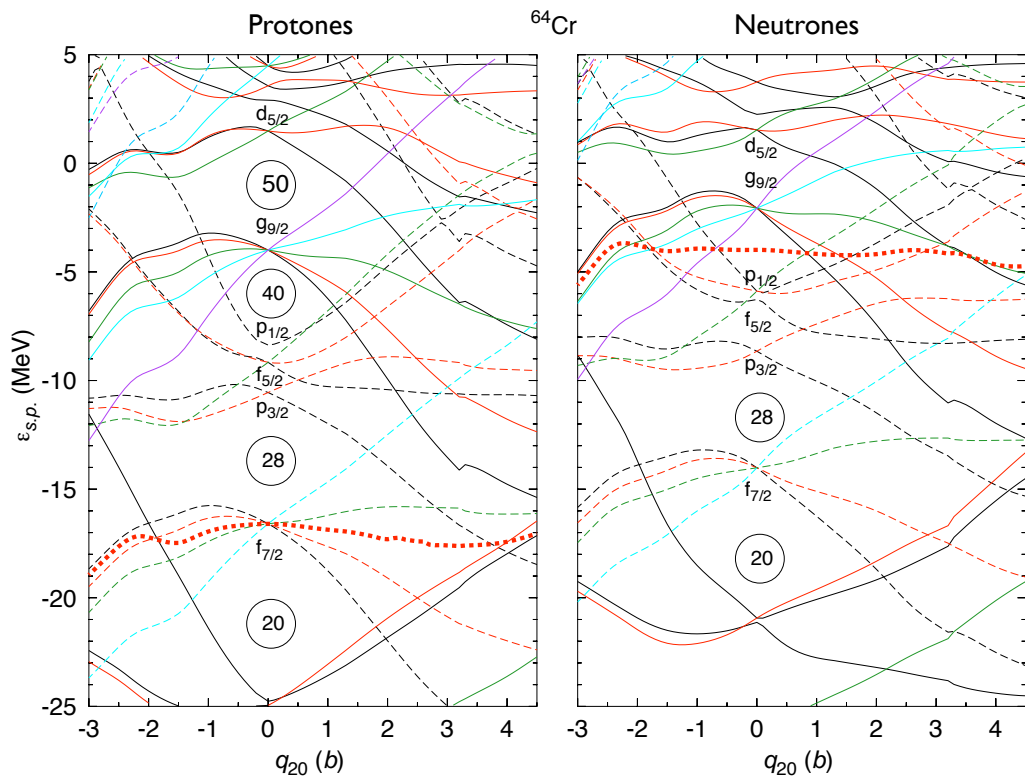


Figura 7.11: Energías de partícula independiente de protones (izquierda) y neutrones (derecha) calculadas en la aproximación de HFB para el núcleo  $^{66}\text{Cr}_{40}$  en función del momento cuadupolar axial. Las líneas continuas se corresponden con estados de paridad positiva mientras que las discontinuas con estados de paridad negativa. La línea roja de puntos es el nivel de Fermi.

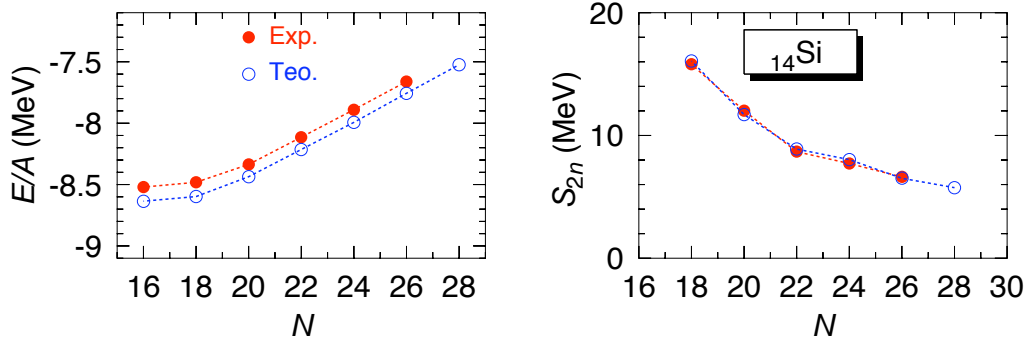


Figura 7.12: Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del silicio. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28]

buen número de partículas [43, 44], se ha demostrado que el núcleo  $^{42}\text{Si}$  tiene deformación cuadrupolar oblada. Es importante notar que en estos casos no se introduce ningún término tensor en la interacción.

A continuación presentamos los resultados obtenidos aplicando el método del generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas VAP proyectadas tanto a buen momento angular como también a buen número de partículas. En la figura (Fig. 7.12) se muestran las energías de ligadura por nucleón y las energías de separación de dos neutrones en función del número de neutrones. Como en las secciones precedentes se observa un exceso de energía de ligadura en la curva teórica con respecto a los datos experimentales aunque la tendencia se reproduce adecuadamente. En relación con las energías de separación de dos neutrones observamos también un buen acuerdo entre el experimento y la teoría. Aquí vemos que a medida que nos acercamos a la línea de goteo de neutrones la  $S_{2n}(N)$  se va haciendo cada vez menor, como es de esperar. En la figura (fig. 7.13) representamos las energías de excitación y las probabilidades de transición del primer estado excitado  $2^+$  tanto teóricas como experimentales de los isótopos  $^{30-42}\text{Si}$ . Al igual que sucede en los isótopos del Ca, Ti y Cr, vemos que los cálculos reproducen la tendencia de los resultados experimentales. Se aprecia claramente el cierre de capas en  $N = 20$ , con un aumento significativo de la energía de excitación y una disminución de la probabilidad de transición. A partir de dicho cierre se observa que los valores de las energías ( $E(2^+)$ ) van disminuyendo a medida que aumenta el número de neutrones alcanzándose el mínimo en el núcleo

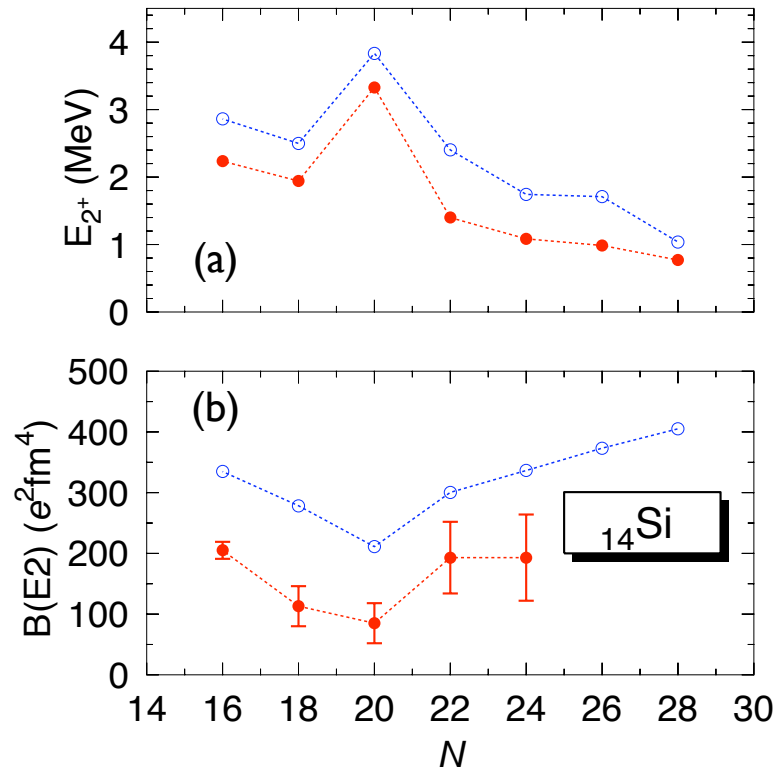


Figura 7.13: (a) Energías de excitación de los primeros estados  $2^+$  y (b) Probabilidades de transición reducidas experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas (puntos azules) para los isótopos del Si. Los datos experimentales están tomados de las referencias [35, 6]



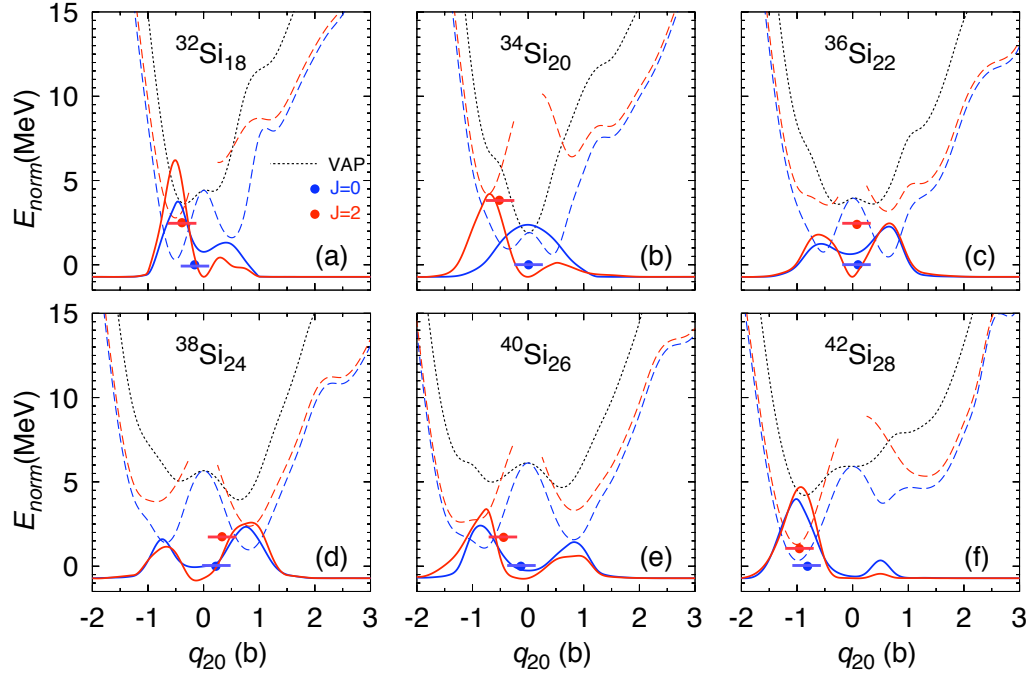


Figura 7.14: Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas), funciones de onda colectivas (líneas continuas) y energías (puntos) de los estados ( $J = 0, \sigma = 0$  (azul)) y ( $J = 2, \sigma = 0$  (rojo)) para los núcleos  $^{32-42}\text{Si}$ . Las energías están normalizadas al valor del estado fundamental ( $J = 0, \sigma = 0$ ) de cada núcleo y su posición indica el valor promedio de la deformación en cada estado.

$^{42}\text{Si}$ . Con las probabilidades de transición ocurre lo contrario, apreciándose un aumento casi lineal con  $N$ . Todo ello indica que los efectos colectivos se van haciendo más importantes a medida que nos acercamos a la línea de goteo de neutrones y que no aparece ningún indicio de cierre de capa en  $N = 28$  ni en la teoría ni en los datos experimentales.

El efecto de la deformación se aprecia en la figura (fig. 7.14), donde se muestran las superficies de energía potencial VAP y proyectadas a  $J = 0, 2$  así como las funciones de onda colectivas resultado del cálculo con el generador de coordenadas. Aquí vemos de nuevo que las curvas de energía se van ensanchando cuando crece el número neutrones en el sistema. Con respecto a las curvas VAP, sólo se obtiene un mínimo esférico que corresponde con el cierre en  $N = 20$  mientras que se tienen mínimos oblatos en los núcleos  $^{32,42}\text{Si}$  y superficies con mínimos prolados y oblatos en el resto de isótopos estudiados. La proyección a buen momento angular amplifica estos efectos y

el resultado final del generador de coordenadas predice una mezcla significativa entre configuraciones proladas y obladas en los estados ( $J = 0, 2; \sigma = 0$ ) en los núcleos  $^{36,38,40}\text{Si}$  que, en promedio tienen una deformación ligeramente prolada en los dos primeros y ligeramente oblada en el último. En el cierre de capas  $N = 20$  se obtiene un estado fundamental esférico mientras que el primer excitado tiene deformación oblada. En cuanto al isótopo  $^{42}\text{Si}$  se observa que tanto el estado fundamental como para el primer  $2^+$  tienen una deformación oblada. Este resultado coincide con los cálculos previamente efectuados con el método del generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas de HFB proyectadas a buen momento angular usando la interacción de Gogny [43]. En esta referencia se muestra además que las capas  $\pi d_{5/2}$  y  $\nu f_{7/2}$  completamente ocupadas en los isótopos del silicio favorece la aparición de deformación en el lado oblado, ya que la energía de dichas órbitas decrece cuando aumenta dicha deformación, mientras que crece en el lado prolado. Por tanto, el aumento de las correlaciones de apareamiento que conlleva el método VAP y la proyección a buen número de partículas no son capaces de evitar la aparición de deformación en el isótopo del silicio con  $N = 28$ , confirmando la erosión del cierre de capas en dicho núcleo.

## 7.4. Resumen

En este capítulo se han estudiado los posibles cierres de capas en núcleos ligeros ricos en neutrones usando el método más allá de campo medio descrito en los capítulos precedentes. Estos cierres son  $N = 32$  y/o  $N = 34$  en los isótopos del calcio, titanio y cromo,  $N = 40$  en los núcleos de cromo y  $N = 28$  en los isótopos del silicio. Para ello se han calculado y comparado con los datos experimentales las cantidades más relevantes para determinar la existencia o degradación de los cierres de capas como son las energías de excitación ( $E(2^+)$ ) y las probabilidades de transición ( $B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+)$ ). Además se ha determinado la calidad de los resultados teóricos para el estado fundamental comparando con los datos experimentales tanto las energías de ligadura por nucleón como las energías de separación de dos neutrones a lo largo de las cadenas isotópicas calculadas. Las conclusiones generales que podemos extraer de este estudio se pueden enumerar en los siguientes puntos:

1. Se obtiene un buen acuerdo entre los resultados teóricos y experimentales de las energías de ligadura por partícula aunque se observa sistemáticamente un exceso de energía de ligadura en los cálculos. Esto se debe principalmente a que la interacción está ajustada globalmente a toda la tabla de núcleos y a nivel de campo medio, con lo que al incluir

más correlaciones se tiene tal efecto. Por otro lado, las energías de separación de dos neutrones teóricas concuerdan con las experimentales en las cadenas isotópicas estudiadas en este capítulo.

2. Los resultados teóricos reproducen la evolución de las energías de excitación ( $E(2^+)$ ) experimentales en función del número de neutrones en los núcleos calculados. También se obtiene un buen acuerdo en las probabilidades de transición. De todo ello podemos extraer, por un lado, que  $N = 32$  es un buen cierre de capas mientras que  $N = 34$  no lo es para los isótopos de Ca, Ti y Cr. Por otro lado, podemos afirmar que tanto  $N = 40$  para el núcleo  $^{64}\text{Cr}$  (con deformación prolada) como  $N = 28$  para el isótopo  $^{42}\text{Si}$  (con deformación oblada) no son buenos cierres de capas.
3. El acuerdo no sólo cualitativo sino también cuantitativo entre los resultados teóricos y experimentales requiere de muchos factores que van más allá de la teoría presentada en esta tesis. Los más importantes serán la inclusión del grado de libertad triaxial y la proyección antes de la variación a buen momento angular para obtener el momento de inercia adecuado. Además, los parámetros de la interacción deberían ajustarse con funciones de onda calculadas con métodos más allá de campo medio. Por último, la introducción de un término tensor en la interacción podría tener relevancia aunque, como hemos podido comprobar en este capítulo, los resultados experimentales se pueden reproducir cualitativamente con una interacción que no incluye tal término, y su efecto en los cálculos con métodos más allá de campo medio estaría también por determinar.

## Referencias

- [1] M. Mayer, Phys. Rev. 75, 1969 (1949)
- [2] O. Axel, J. H. D. Jensen, H. D. Suess, Phys. Rev. 75, 1766 (1949)
- [3] D. Guillemaud-Mueller, C. Detraz, M. Langevin, F. Naulin, M. de Saint-Simon, C. Thibault, F. Touchard, M. Ephre Nucl. Phys. A 426, 37 (1984)
- [4] T. Motobayashi,, Y. Ikeda, K. Ieki, M. Inoue, N. Iwasa, T. Kikuchi, M. Kurokawa, S. Moriya, S. Ogawa, H. Murakami, S. Shimoura, Y. Yanagisawa, T. Nakamura, Y. Watanabe, M. Ishihara, b, T. Teranishi, H. Okuno and R. F. Casten, Phys. Lett. B 346, 9 (1995)
- [5] C. M. Campbell, N. Aoi, D. Bazin, M. D. Bowen,, B. A. Brown, J. M. Cook,, D.-C. Dinca, A. Gade,, T. Glasmacher, M. Horoi, S. Kanno, T. Motobayashi, W. F. Mueller, H. Sakurai, K. Starosta,, H. Suzuki, S. Takeuchi, J. R. Terry,, K. Yoneda, H. Zwahlen, Phys. Rev. Lett. 97, 112501 (2006)
- [6] B. Bastin, S. Grévy, D. Sohler, O. Sorlin, Zs. Dombrádi, N. L. Achouri, J. C. Angélique, F. Azaiez, D. Baiborodin, R. Borcea, C. Bourgeois, A. Buta, A. Bürger, R. Chapman, J. C. Dalouzy, Z. Dlouhy, A. Drouard, Z. Elekes, S. Franchoo, S. Iacob, B. Laurent, M. Lazar, X. Liang, E. Liénard, J. Mrazek, L. Nalpas, F. Negoita, N. A. Orr, Y. Penionzhkevich, Zs. Podolyák, F. Pougheon, P. Roussel-Chomaz, M. G. Saint-Laurent, M. Stanoiu, I. Stefan, F. Nowacki, A. Poves, Phys. Rev. Lett. 99, 022503 (2007)
- [7] A. Huck, G. Klotz, A. Knipper, C. Miehé, C. Richard-Serre, G. Walter, A. Poves, H. L. Ravn, G. Marguier, Phys. Rev. C 31, 2226 (1985)
- [8] S. N. Liddick, P. F. Mantica, R. V. F. Janssens, R. Broda, B. A. Brown, M. P. Carpenter, B. Fornal, M. Honma, T. Mizusaki, A. C. Morton, W. F. Mueller, T. Otsuka, J. Pavan, A. Stolz, S. L. Tabor, B. E. Tomlin, M. Wiedeking, Phys. Rev. Lett. 92, 072502 (2004)
- [9] R. V. F. Janssens, B. Fornal, P. F. Mantica, B. A. Brown, R. Broda, P. Bhattacharyya, M. P. Carpenter, M. Cinausero, P. J. Daly, A. D. Davies, T. Glasmacher, Z. W. Grabowski, D. E. Groh, M. Honma, F. G. Kondev, W. Krolas, T. Lauritsen, S. N. Liddick, S. Lunardi, N. Marginean, T. Mizusaki, D. J. Morrissey, A. C. Morton, W. F. Mueller, T. Otsuka, T.

## Referencias

---

- Pawlat, D. Seweryniak, H. Schatz, A. Stolz, S. L. Tabor, C. A. Ur, G. Viesti, I. Wiedenhover, J. Wrzesinski, *Phys. Lett. B* 546, 55 (2002)
- [10] S. N. Liddick, P. F. Mantica, R. Broda, B. A. Brown, M. P. Carpenter, A. D. Davies, B. Fornal, T. Glasmacher, D. E. Groh, M. Honma, M. Horoi, R. V. F. Janssens, T. Mizusaki, D. J. Morrissey, A. C. Morton, W. F. Mueller, T. Otsuka, J. Pavan, H. Schatz, A. Stolz, S. L. Tabor, B. E. Tomlin, M. Wiedeking, *Phys. Rev. C* 70, 064303 (2004)
- [11] B. Fornal, S. Zhu, R. V. F. Janssens, M. Honma, R. Broda, P. F. Mantica, B. A. Brown, M. P. Carpenter, P. J. Daly, S. J. Freeman, Z. W. Grabowski, N. J. Hammond, F. G. Kondev, W. Krolas, T. Lauritsen, S. N. Liddick, C. J. Lister, E. F. Moore, T. Otsuka, T. Pawlat, D. Seweryniak, B. E. Tomlin, J. Wrzesinski, *Phys. Rev. C* 70, 064304 (2004)
- [12] J. I. Prisciandaro, P. F. Mantica, D. W. Anthony, M. W. Cooper, A. Garcia, D. E. Groh, A. Komives, W. Kumarasiri, A. M. Oros-Peusquens, S. L. Tabor, M. Wiedeking, *Nucl. Phys. A* 682, 200c (2001)
- [13] J. I. Prisciandaro, P. F. Mantica, B. A. Brown, D. W. Anthony, M. W. Cooper, A. Garcia, D. E. Groh, A. Komives, W. Kumarasiri, P. A. Lofy, A. M. Oros-Peusquens, S. L. Tabor, M. Wiedeking, *Phys. Lett. B* 510, 17 (2001)
- [14] T. Otsuka, R. Fujimoto, Y. Utsuno, B. A. Brown, M. Honma, T. Mizusaki, *Phys. Rev. Lett.* 87, 082502 (2001)
- [15] T. Otsuka, Y. Utsuno, R. Fujimoto, B. A. Brown, M. Honma, T. Mizusaki, *Eur. Phys. J. A.* 15, 151 (2002)
- [16] T. Otsuka, T. Suzuki, R. Fijimoto, H. Grawe, Y. Akaishi, *Phys. Rev. Lett.* 95, 232502 (2005)
- [17] A. P. Zuker, *Nucl. Phys. A* 576, 65 (1994)
- [18] J. Duflo, A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* 59, R2347 (1999)
- [19] T. Otsuka, T. Matsuo, D. Abe, *Phys. Rev. Lett.* 97, 162501 (2006)
- [20] E. Courier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys.* 77, 427 (2005)
- [21] A. Poves, A. P. Zuker, *Phys. Rep.* 70, 235 (1981)

- [22] D. -C. Dinca, R. V. F. Janssens, A. Gade, D. Bazin, R. Broda, B. A. Brown, C. M. Campbell, M. P. Carpenter, P. Chowdhury, J. M. Cook, A. N. Deacon, B. Fornal, S. J. Freeman, T. Glasmacher, M. Honma, F. G. Kondev, J.-L. Lecouey, S. N. Liddick, P. F. Mantica, W. F. Mueller, H. Olliver, T. Otsuka, J. R. Terry, B. A. Tomlin, K. Yoneda, Phys. Rev. C 71, 041302(R) (2005).
- [23] A. Bürger, T. R. Saito, H. Grawe, H. Hubel, P. Reiter, J. Gerl, M. Gorska, H.J. Wollersheim, A. Al-Khatib, A. Banu, T. Beck, F. Becker, P. Bednarczyk, G. Benzoni, A. Bracco, S. Brambilla, P. Bringel, F. Camera, E. Clement, P. Doornenbal, H. Geissel, A. Gorgen, J. Grebosz, G. Hammond, M. Hellstrom, M. Honma, M. Kavatsyuk, O. Kavatsyuk, M. Kmiecik, I. Kojouharov, W. Korten, N. Kurz, R. Lozeva, A. Maj, S. Mandal, B. Million, S. Muralithar, A. Neusser, F. Nowacki, T. Otsuka, Zs. Podolyak, N. Saito, A. K. Singh, H. Weick, C. Wheldon, O. Wieland, M. Winkler, Phys. Lett. B 622, 29 (2005).
- [24] M. Honma, T. Otsuka, B. A. Brown, T. Mizusaki, Phys. Rev. C 65, R061301 (2002)
- [25] A. Poves, J. Sánchez-Solano, E. Caurier, F. Nowacki, Nucl. Phys. A 694, 157 (2001)
- [26] A. Poves, F. Nowacki, E. Caurier Phys. Rev. C 72, 047302 (2005)
- [27] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, Phys. Rev. Lett 99, 062501 (2007)
- [28] G. Audi, A. H. Wapstra, C. Thibault, Nucl. Phys. A 729, 337 (2003)
- [29] J.L. Egido, L.M. Robledo, *Lecture Notes in Physics*, edited by G. Lalazissis, P. Ring, and D. Vretenar (Springer-Verlag, Heidelberg, 2004), Vol. 641, p.269.
- [30] M. Honma, T. Otsuka, B. A. Brown, T. Mizusaki, Eur. Phys. J. A 25, 499 (2005)
- [31] O. Sorlin, S. Leenhardt, C. Donzaud, J. Duprat, F. Azaiez, F. Nowacki, H. Grawe, Zs. Dombrádi, F. Amorini, A. Astier, D. Baiborodin, M. Belleguic, C. Borcea, C. Bourgeois, D. M. Cullen, Z. Dlouhy, E. Dragulescu, M. Górska, S. Grévy, D. Guillemaud-Mueller, G. Hagemann, B. Herskind, J. Kiener, R. Lemmon, M. Lewitowicz, S. M. Lukyanov, P. Mayet, F. de Oliveira Santos, D. Pantalica, Yu.-E. Penionzhkevich, F. Pougheon, A. Poves, N. Redon, M. G. Saint-Laurent, J. A. Scarpaci,

- G. Sletten, M. Stanoiu, O. Tarasov, Ch. Theisen, Phys. Rev. Lett. 88, 092501 (2002)
- [32] O. Sorlin, C. Donzaud, F. Nowacki, J.C. Angélique, F. Azaiez, C. Bourgeois, V. Chiste, Z. Dlouhy, S. Grévy, D. Guillemaud-Mueller, F. Ibrahim, K.-L. Kratz, M. Lewitowicz, S. M. Lukyanov, J. Mrasek, Yu.-E. Penionzhkevich, F. de Oliveira Santos, B. Pfeiffer, F. Pougheon, A. Poves, M.G. Saint-Laurent, M. Stanoiu, Eur. Phys. J. A 16, 55 (2003)
- [33] S. J. Freeman, R. V. F. Janssens, B. A. Brown, M. P. Carpenter, S. M. Fischer, N. J. Hammond, M. Honma, T. Lauritsen, C. J. Lister, T. L. Khoo, G. Mukherjee, D. Seweryniak, J. F. Smith, B. J. Varley, M. Whitehead, S. Zhu, Phys. Rev. C 69, 064301 (2004)
- [34] S. Zhu, A. N. Deacon, S. J. Freeman, R. V. F. Janssens, B. Fornal, M. Honma, F. R. Xu, R. Broda, I. R. Calderin, M. P. Carpenter, P. Chowdhury, F. G. Kondev, W. Krolas, T. Lauritsen, S. N. Liddick, C. J. Lister, P. F. Mantica, T. Pawlat, D. Seweryniak, J. F. Smith, S. L. Tabor, B. E. Tomlin, B. J. Varley, J. Wrzesinski, Phys. Rev. C 74, 064315 (2006)
- [35] ENDSF database, <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>
- [36] J. Fridmann, I. Wiedenhover, A. Gade, L. T. Baby, D. Bazin, B. A. Brown, C. M. Campbell, J. M. Cook, P. D. Cottle, E. Diffenderfer, D.-C. Dinca, T. Glasmacher, P. G. Hansen, K. W. Kemper, J. L. Lecouey, W. F. Mueller, H. Olliver, E. Rodriguez-Vieitez, J. R. Terry, J. A. Tostevin, K. Yoneda, Nature (London) 435, 922 (2005)
- [37] S. Grevy, J. C. Angélique, P. Baumann, C. Borcea, A. Buta, G. Canchel, W. N. Catford, S. Courtin, J. M. Daugas, F. de Oliveira, P. Dessagne, Z. Dlouhy, A. Knipper, K. L. Kratz, F. R. Lecolley, J. L. Lecouey, G. Lehrsenné, M. Lewitowicz, E. Lienard, S. Lukyanov, F. Marechal, C. Miehé, J. Mrázek, F. Negoita, N. A. Orr, D. Pantelica, Y. Penionzhkevich, J. Peter, B. Pfeiffer, S. Pietri, E. Poirier, O. Sorlin, M. Stanoiu, I. Stefan, C. Stodel, C. Timis, Phys. Lett. B 594, 252 (2004)
- [38] L. Gaudefroy, O. Sorlin, D. Beaumel, Y. Blumenfeld, Z. Dombrádi, S. Fortier, S. Franchoo, M. Gélín, J. Gibelin, S. Grévy, F. Hammache, F. Ibrahim, K. W. Kemper, K.-L. Kratz, S. M. Lukyanov, C. Monrozeau, L. Nalpas, F. Nowacki, A. N. Ostrowski, T. Otsuka, Yu.-E. Penionzhkevich, J. Piekarewicz, E. C. Pollacco, P. Roussel-Chomaz, E. Rich, J.

- A. Scarpaci, M. G. St. Laurent, D. Sohler, M. Stanoiu, T. Suzuki, E. Tryggestad, D. Verney, Phys. Rev. Lett. 97, 092501 (2006)
- [39] G. A. Lalazissis, D. Vretenar, P. Ring, M. Stoitsov, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 60, 014310 (1999)
- [40] S. Péru, M. Girod, J. F. Berger, Eur. Phys. J. A 9, 35 (2000)
- [41] T. R. Werner, J. A. Sheikh, M. Misu, W. Nazarewicz, J. Rikowska, K. Heeger, A. S. Umar, M. R. Strayer, Nucl. Phys. A 597, 327 (1996)
- [42] P.-G. Reinhard, D. J. Dean, W. Nazarewicz, J. Dobaczewski, J. A. Maruhn, and M. R. Strayer, Phys. Rev. C 60, 014316 (1999)
- [43] R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, L. M. Robledo, Phys. Rev. C 65, 024304 (2002)
- [44] R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, L. M. Robledo, Acta Phys. Pol. B 32, 2385 (2001)



## Capítulo 8

# Estudio de las transiciones de forma en los isótopos de neodimio

En este capítulo se estudiarán las transiciones de forma, de núcleos esféricos a prolados, que se producen en los isótopos de neodimio ( $^{144-154}_{60}\text{Nd}$ ). En general, las transiciones de forma se han analizado ampliamente con los modelos algebraicos de bosones interactuantes (*Interacting Boson Models, IBM*) [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. En esta aproximación, los núcleos esféricos, prolados y blandos en la dirección  $\gamma$  ( $\gamma$ -soft) están asociados a las simetrías dinámicas del modelo, U(5), SU(3) y O(6) respectivamente. Por otro lado, el límite clásico del IBM se reduce al modelo colectivo de Bohr, que permite la descripción del sistema de muchos cuerpos cuántico en términos de un hamiltoniano a un cuerpo con un potencial que depende de las variables colectivas  $V(\beta, \gamma)$  [9, 10, 11]. Dicho hamiltoniano se puede resolver analíticamente en ciertos límites y sus soluciones sirven para definir las principales características de las transiciones de forma. Recientemente, Iachello ha desarrollado soluciones del modelo colectivo en los puntos críticos renovando así el interés por el estudio de estos sistemas [12, 13]. Asimismo, con estas investigaciones se ha podido determinar, dentro del marco del modelo, el carácter de las transiciones esférico-prolado (primer orden) y esférico- $\gamma$ -soft (segundo orden), además de identificar las simetrías correspondientes a los puntos críticos, X(5) en el primer caso y E(5) en el segundo.

Una manera útil de representar las transiciones de forma en el marco de los modelos de bosones interactuantes es el denominado triángulo de Casten (fig. 8.1). Aquí, las simetrías dinámicas U(5), SU(3) y O(6) del IBM están situadas en los vértices de un triángulo y las simetrías críticas se correspon-

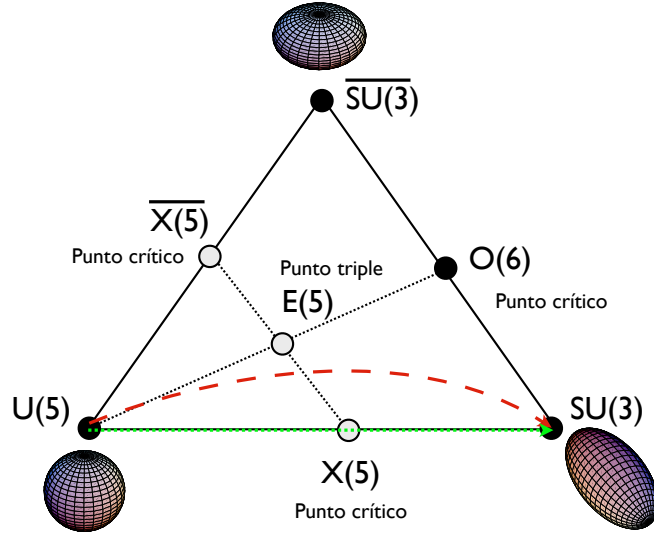


Figura 8.1: Triángulo de Casten extendido a deformaciones obladas. El triángulo original lo forman los vértices  $U(5)$ ,  $SU(3)$ ,  $O(6)$ . La línea verde corresponde con la trayectoria puramente axial para la transición oblado-prolado mientras que la roja es la propuesta en este trabajo.

den con puntos en los lados. Además, este triángulo se puede extender a las regiones con deformación oblada ( $\overline{SU(3)}$ ) y, en este caso,  $O(6)$  se entiende como una simetría crítica entre las transiciones prolado-oblado mientras que la  $E(5)$  es en realidad el denominado punto triple nuclear [14].

Como se ha comentado previamente, cada uno de los sistemas cuánticos a un cuerpo asociados a las simetrías se pueden resolver analíticamente. Estas expresiones, salvo factores de escala, se pueden usar para comparar directamente con los datos experimentales e inferir si a un núcleo concreto se le puede atribuir un carácter vibracional ( $E(J) \sim J$ ,  $U(5)$ ), rotacional ( $E(J) \sim J(J+1)$ ,  $SU(3)$ ), etc. Con este argumento también se han tratado de identificar los núcleos que corresponderían a los puntos críticos propuestos por el modelo. Para ello, se comparan los espectros experimentales con los predichos por las soluciones del hamiltoniano colectivo construido con los potenciales correspondientes a las simetrías críticas. Con este criterio se ha encontrado que los núcleos  $^{152}\text{Sm}$  y  $^{150}\text{Nd}$  se pueden asociar a la simetría  $X(5)$  [15, 16] así como que el núcleo  $^{134}\text{Ba}$  se corresponde con la simetría  $E(5)$  [17] de los modelos colectivos.

No obstante, hay que mencionar que, tanto los modelos algebraicos de bosones interactuantes, como los modelos geométricos colectivos simplifican drásticamente el problema de muchos cuerpos nuclear subyacente. Los primeros tienen una gran cantidad de parámetros libres, que se ajustan incluso de un elemento a otro, con lo que su poder predictivo está muy limitado. Con respecto a los segundos, tampoco se tiene ninguna justificación microscópica de los potenciales usados en el modelo colectivo basada en cálculos realistas con interacciones nucleón-nucleón razonables. En particular, como se verá más adelante, éstos ignoran gran parte de los grados de libertad nucleares y se centran en el estudio de la deformación cuadrupolar. Por tanto, en este capítulo se va a estudiar desde un punto de vista microscópico, con la interacción de Gogny, la transición esférico-prolato que se produce en los isótopos de neodimio y se tratará de determinar si, desde este punto de vista, los modelos geométricos que se han propuesto para describir dicha transición son válidos. Además, se analizará si en los cálculos autoconsistentes más allá de campo medio se obtienen indicios de la simetría  $X(5)$  [13].

Desde el punto de vista microscópico, se han usado distintas aproximaciones de campo medio autoconsistente con interacciones fenomenológicas efectivas, como las descritas en el capítulo 3, para describir las transiciones de forma en la región con  $A \sim 150$  [18, 19, 20]. No obstante, aquí se usarán también los métodos más allá de campo medio, con lo que se podrán calcular no sólo las superficies de energía potencial que describen cualitativamente las transiciones de fase, sino también propiedades espectroscópicas comparables directamente con los resultados experimentales.

## 8.1. Estudio de las superficies de energía potencial

En primer lugar vamos a estudiar las superficies de energía potencial en función de la deformación cuadrupolar en el modelo de Bohr. El potencial que describe la transición entre núcleos esféricos y con deformación prolada ( $U(5) \rightarrow SU(3)$ ) se puede escribir en las variables colectivas  $(\beta, \gamma)$  como [13]:

$$V(\beta, \gamma) = \frac{N\beta^2}{1 + \beta^2} \left[ 1 + \frac{5}{4}\zeta \right] - \frac{N(N-1)}{(1 + \beta^2)^2} \zeta \left[ 4\beta^2 + 2\sqrt{2}\beta^3 \cos 3\gamma + \frac{1}{2}\beta^4 \right] \quad (8.1)$$

donde  $N$  es el número de pares de valencia y  $0 \leq \zeta \leq 1$  es el parámetro de control continuo, que determina en gran medida la forma final del potencial. En la figura (fig. 8.2) se representa este potencial para los valores más

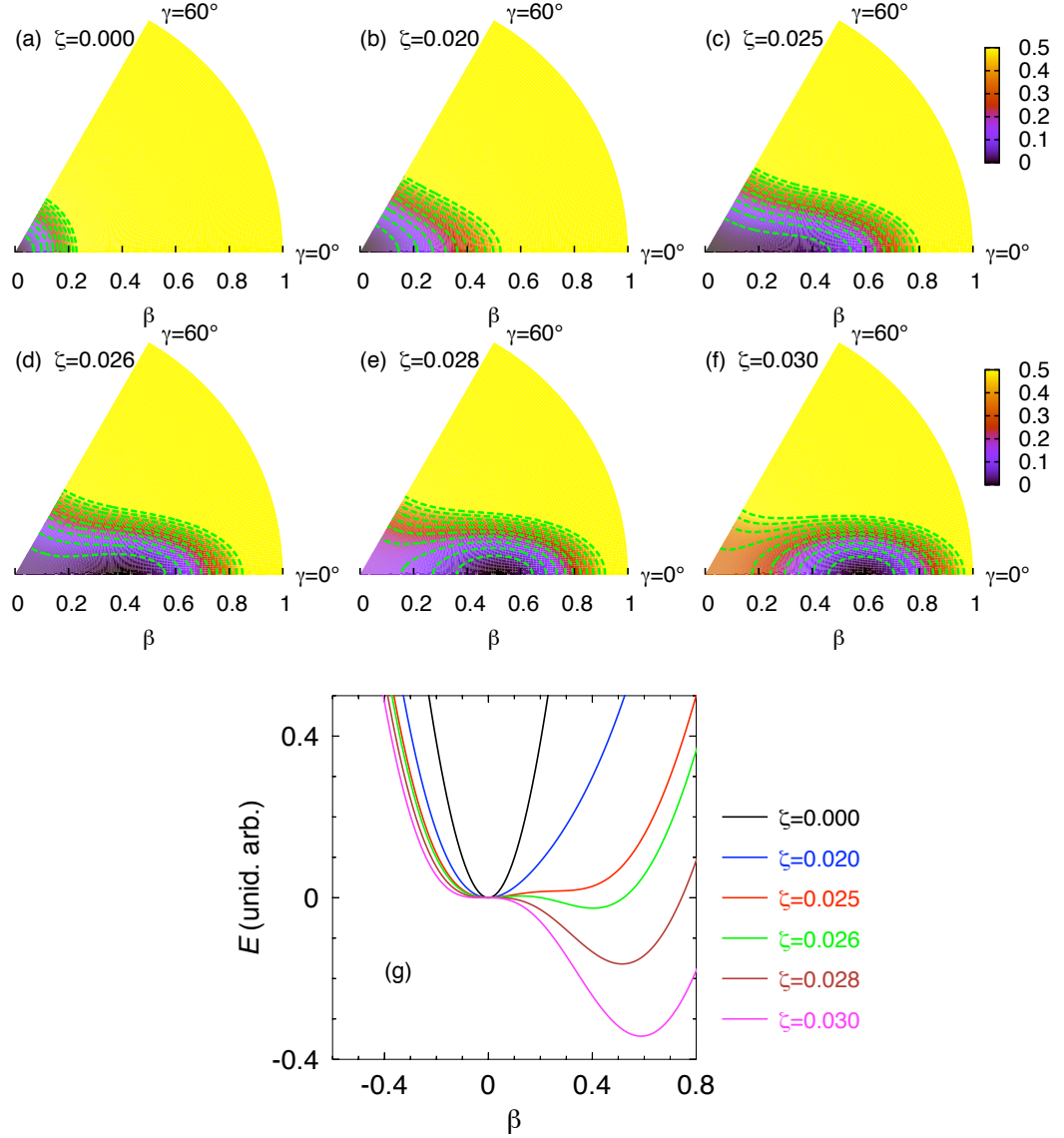


Figura 8.2: (a)-(f) Potencial  $V(\beta, \gamma)$  (ec. 8.1) dado por el modelo colectivo para la transición U(5)-SU(3) con distintos valores del parámetro de control  $\zeta$ . Las líneas de contorno representan un salto de 0.05 unidades arbitrarias y el cero de energía de las superficies se corresponde con el mínimo. Además se representan los valores del potencial correspondientes a la trayectoria axial  $\gamma = 0^\circ, 60^\circ$ , éstos sin normalizar.

significativos de  $\zeta$  tanto en todo el plano  $(\beta, \gamma)$  (fig. 8.2(a)-(f)) como en la trayectoria axial (fig. 8.2(g)). En este ejemplo se ha escogido  $N = 10$  como en la referencia [13]. Aquí podemos ver la evolución desde un potencial esférico ( $\zeta = 0$ ), cuyo mínimo se encuentra en  $\beta = 0$ , hasta potenciales con mínimos deformados bien definidos ( $\zeta = 0.028, 0.030$  por ejemplo). Entre ambas situaciones observamos que se obtienen superficies de energía potencial prácticamente degeneradas a lo largo de la dirección de deformación prolada en un intervalo de  $\beta \in [0, 0.4]$ . Estas superficies se corresponden a su vez con un rango de valores muy reducido del parámetro de control ( $0.025 \leq \zeta \leq 0.026$ ), donde están compitiendo el mínimo esférico y el prolado. El punto crítico de esta transición de fase se corresponde con el valor de  $\zeta$  para el que ambos mínimos están degenerados.

Con un potencial de estas características Iachello desarrolló las soluciones analíticas de la simetría X(5), que describe el punto crítico de la transición de forma esférica-prolada puramente axial (véase la línea verde de la figura 8.1). Para obtener dichas soluciones, supuso que el potencial era separable en las variables  $(\beta, \gamma)$ . Además, asumió un potencial de oscilador armónico en la dirección  $\gamma$  y aproximó el potencial en la dirección  $\beta$  (casi plano con los mínimos esférico y prolado casi degenerados que se aprecia en la figura (fig. 8.2(g) con  $0.025 \leq \zeta \leq 0.026$ ) por un pozo de potencial infinito en un intervalo de  $\beta \in [0, \beta_M]$  [13]. Con estas aproximaciones, finalmente obtuvo el espectro de energías correspondiente y las funciones de onda del hamiltoniano colectivo. Más adelante se compararán los resultados predichos por esta aproximación con el espectro experimental del núcleo  $^{150}\text{Nd}$  y teórico del  $^{148}\text{Nd}$ .

A continuación comparamos las superficies de potencial del modelo colectivo con las obtenidas para los isótopos de neodimio  $^{144-154}\text{Nd}$  con la interacción de Gogny. Con ello podremos dilucidar si en los cálculos microscópicos autoconsistentes con interacciones efectivas se observa el tipo de transiciones tan suaves que se obtienen con el potencial de la ecuación (ec. 8.1). En la figura (fig. 8.3) se muestran las superficies de energía potencial en el plano  $(\beta, \gamma)$  calculadas con funciones de onda VAP proyectadas a buen número de partículas (ec. 5.37):

$$e_{\text{VAP}}^{NZ}(\beta, \gamma) = \frac{\langle \text{VAP}(\beta, \gamma) | \hat{H} P^N P^Z | \text{VAP}(\beta, \gamma) \rangle}{\langle \text{VAP}(\beta, \gamma) | P^N P^Z | \text{VAP}(\beta, \gamma) \rangle} \quad (8.2)$$

El cálculo autoconsistente se ha efectuado con la parametrización D1S de

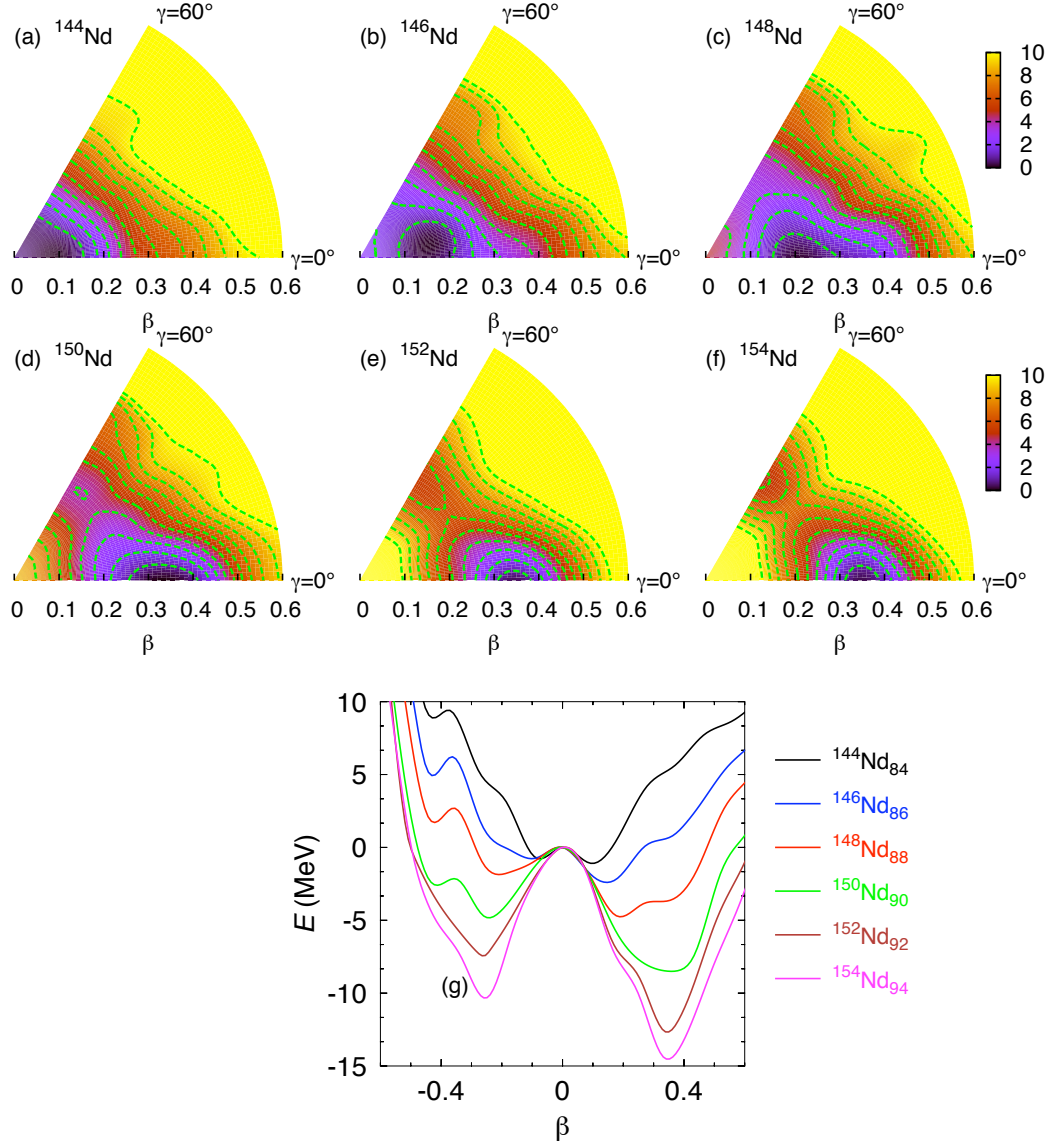


Figura 8.3: (a)-(f) Superficies de energía potencial en el plano  $(\beta, \gamma)$  proyectadas a buen número de partículas calculadas con funciones de onda VAP con la interacción de Gogny D1S para los isótopos del neodimio  $^{144-154}_{60}\text{Nd}$ . Las líneas de contorno representan un salto de 1 MeV y el cero de energía de las superficies se corresponde con el mínimo. Además se representan los valores del potencial correspondientes a la trayectoria axial  $\gamma = 0^\circ, 60^\circ$  donde se ha elegido el cero de energía en el valor correspondiente a  $\beta = 0$ .

la interacción de Gogny y en un espacio de configuración de doce capas de oscilador. La figura muestra la transición de forma desde un núcleo prácticamente esférico ( $^{144}\text{Nd}$ ) a núcleos deformados ( $^{152-154}\text{Nd}$ ). En estos límites podemos apreciar cierta similitud con las superficies de energía potencial del modelo de Bohr (fig. 8.2(b) en el primer caso y fig. 8.2(f) en el segundo).

Sin embargo, en el cálculo microscópico observamos también bastantes diferencias. Por un lado, debido a la estructura de capas subyacente, las superficies no son tan suaves como en el modelo colectivo. Además, como es obvio, no existe un parámetro de control continuo en la cadena isotópica. No obstante, la diferencia más importante está en el papel que juega el grado de libertad triaxial en los cálculos con la interacción de Gogny. En este caso vemos que en los núcleos de transición  $^{146-150}\text{Nd}$  se observa un reblandecimiento de las superficies en la dirección prolada axial, como en la figura (fig. 8.2), pero también en la dirección  $\gamma$ , algo que no existe en el potencial dado por la ecuación (ec. 8.1). Así, en el núcleo  $^{146}\text{Nd}$  se tiene un mínimo prolado ( $\beta = 0.15$ ) aunque entre  $\beta = 0$  hasta  $\beta = 0.3$  y en todo el rango de  $\gamma$  se tienen estados con una diferencia de energía de alrededor de 3 MeV. Para el núcleo  $^{148}\text{Nd}$  vemos que el mínimo se ha desplazado ( $\beta = 0.20$ ) y, en este caso, se tiene un intervalo de deformaciones entre ( $\beta = 0.1 - 0.4, \gamma = 0^\circ$ ) y ( $\beta = 0.2, \gamma = 0^\circ - 50^\circ$ ) con soluciones separadas en energía a menos de 3 MeV con respecto de la energía del mínimo. La misma tendencia se observa en el núcleo  $^{150}\text{Nd}$  (mínimo prolado desplazado a valores más altos de  $\beta$  y suavidad en la dirección  $\gamma$ ). Finalmente, como ya se ha comentado más arriba, los núcleos  $^{152-154}\text{Nd}$  presentan mínimos prolados relativamente simétricos y separados por barreras de potencial muy grandes del resto del plano  $(\beta, \gamma)$ .

En la figura (fig. 8.3(g)) se muestran las trayectorias axiales de las superficies anteriormente descritas ( $\gamma = 0^\circ$  lado prolado,  $\gamma = 60^\circ$  lado oblado). Aquí vemos que, en contraste con la figura (fig. 8.2(g)), en todos los casos se obtienen mínimos prolados y oblados, siendo el punto  $\beta = 0$  un máximo. La deformación correspondiente a dichos mínimos se desplaza hacia valores más altos a medida que aumenta el número másico. Además, la diferencia en energía entre los mínimos prolado y oblado, así como la barrera que los separa crece también con el número de neutrones en el sistema. Así, mientras que en el núcleo  $^{144}\text{Nd}$  se obtienen mínimos prácticamente degenerados y separados por una barrera de  $\sim 1$  MeV, para el resto de isótopos se tienen diferencias entre los mínimos de aproximadamente 1.4, 3.0, 3.8, 5.2 y 2.2 MeV, separados por barreras de 2.0, 4.7, 8.5, 12.5 y 12.5 MeV para los núcleos  $^{146,148,150,152,154}\text{Nd}$  respectivamente. No obstante, hay que notar que los mínimos oblados, en los casos  $^{144-150}\text{Nd}$ , están asociados a puntos de silla en el

plano  $(\beta, \gamma)$ , mientras que para los isótopos  $^{152-154}\text{Nd}$  son verdaderos mínimos, aunque éstos apenas tienen influencia en el espectro de baja energía por las enormes barreras que los separan del mínimo absoluto.

## 8.2. Análisis espectroscópico con simetría axial

El estudio de las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas sólo nos da una visión cualitativa de las transiciones de forma. Sin embargo, a partir de dichas superficies no se puede extraer información espectroscópica ni tampoco incluir la influencia de las fluctuaciones en la forma. Para ello aplicamos el método del generador de coordenadas a lo largo de la deformación cuadrupolar axial con proyección a buen número de partículas y momento angular. Como se ha señalado en la sección anterior, los efectos triaxiales pueden jugar un papel importante en los núcleos donde se produce la transición. Sin embargo, la mezcla de configuraciones con proyección a buen momento angular triaxial está fuera del alcance de la capacidad de cálculo actual. Aún así, una desviación significativa en las predicciones teóricas de los datos experimentales indicaría precisamente que no se han incluido en el cálculo todos los grados de libertad relevantes.

En primer lugar, analizamos los efectos de la proyección a buen momento angular y del generador de coordenadas en el estado fundamental y los primeros excitados ( $J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+$ ) en la figuras (figs. 8.4-8.5). En los isótopos  $^{144-146}\text{Nd}$  la superficie de energía potencial (ec. 6.35) con  $J = 0$  presenta dos mínimos casi degenerados alrededor de  $\beta = 0$  y mínimos prolados más profundos para valores más altos del espín. Las funciones de onda colectivas (ec. 6.51) muestran una mezcla de configuraciones obladas-proladas bastante apreciable en los estados fundamentales, siendo el núcleo  $^{146}\text{Nd}$  más deformado que el  $^{144}\text{Nd}$ . Esta mezcla tiende a desaparecer a medida que aumenta el valor del momento angular obteniéndose funciones de onda netamente proladas. Por otro lado, para los isótopos  $^{148-154}\text{Nd}$ , las funciones de onda colectivas pican claramente en valores positivos de  $\beta$  tanto en el estado fundamental como en los excitados, indicando que en estos núcleos existen bandas rotacionales construidas sobre el estado fundamental. Además, dichas funciones colectivas son más estrechas, y el mínimo se desplaza a valores más altos de la deformación cuadrupolar, cuanto mayor es el número de neutrones en el sistema. Estos resultados son consistentes con las superficies de energía potencial subyacentes representadas con líneas discontinuas en las



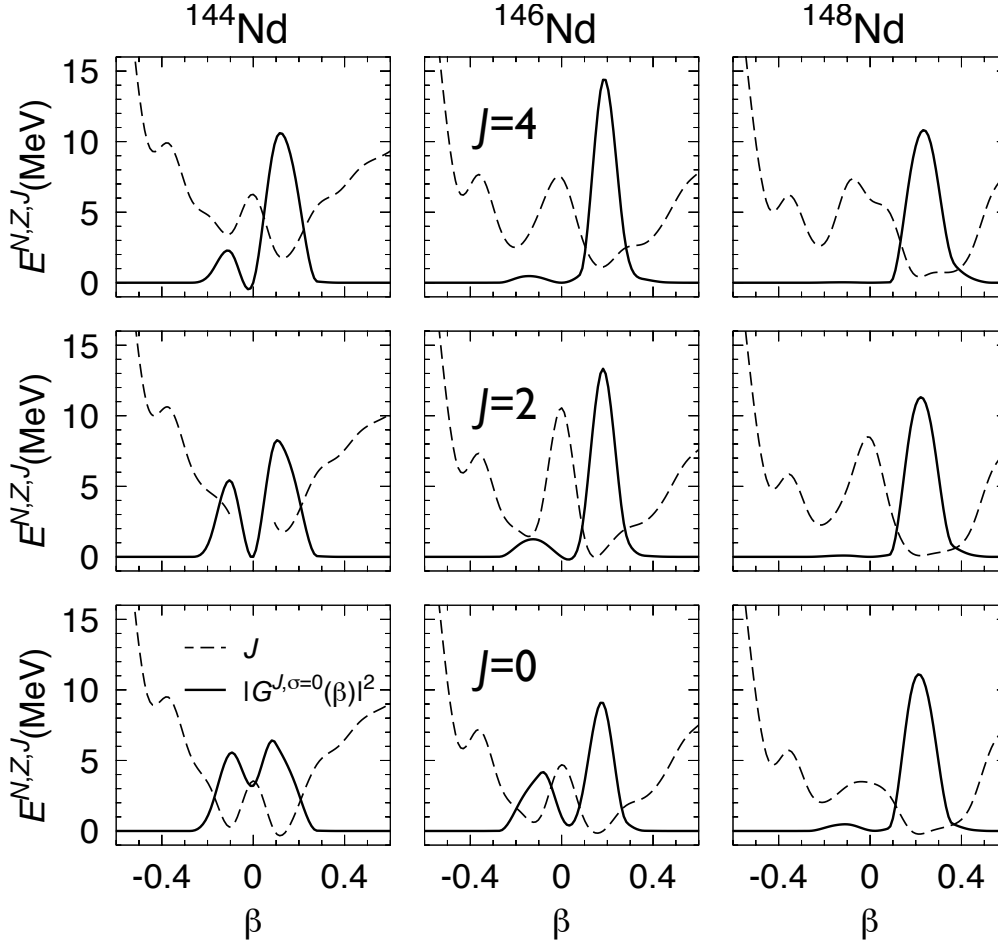


Figura 8.4: Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas) y funciones de onda colectivas (líneas continuas) a lo largo de la deformación cuadupolar axial ( $\beta$ ) para  $J = 0$  (panel inferior),  $J = 2$  (panel central) y  $J = 4$  panel (superior) calculadas para los isótopos  $^{144-148}\text{Nd}$ . El cero de energía se corresponde con el valor de la energía para el estado  $J = 0, \sigma = 0$  de cada núcleo.

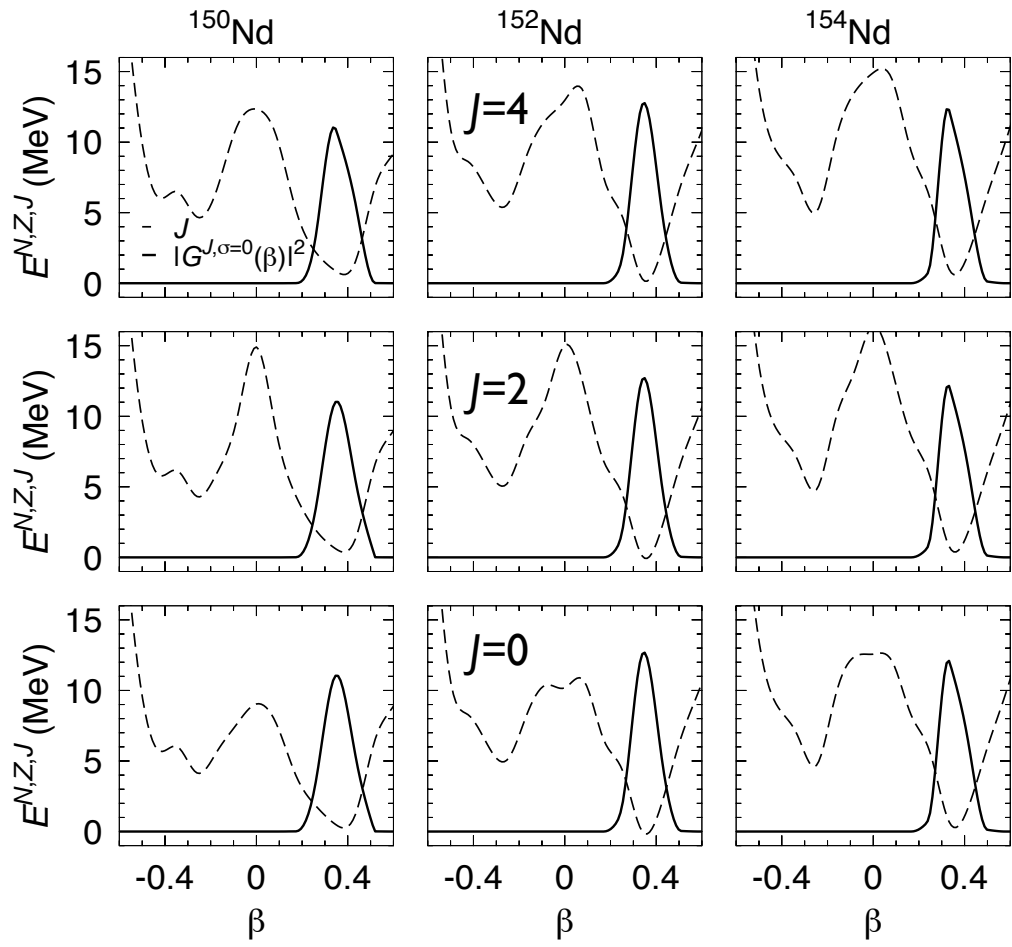


Figura 8.5: *Ídem* figura 8.4 pero para los isótopos  $^{150-154}\text{Nd}$ .

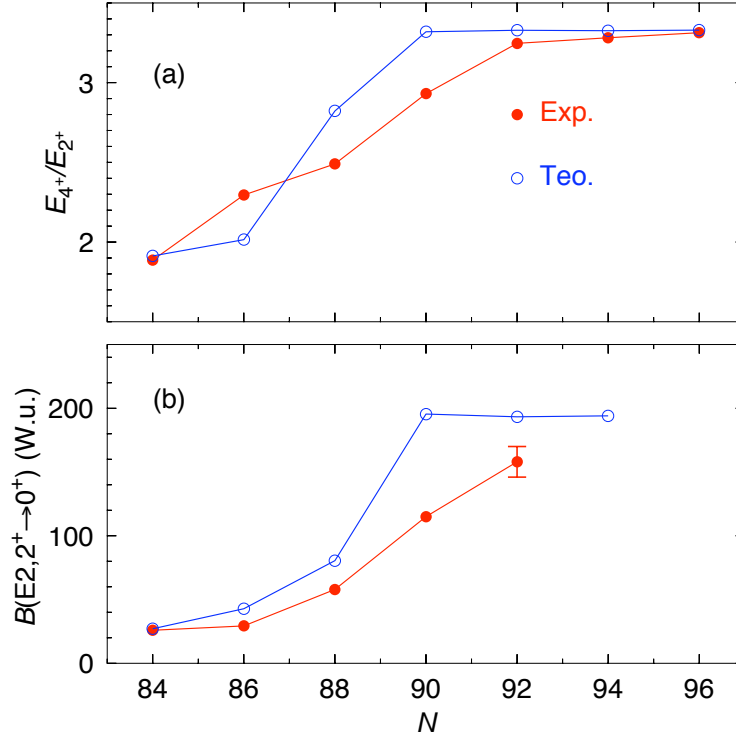


Figura 8.6: (a) Cociente entre las energías de los primeros estados  $4^+$ ,  $2^+$ . (b) Probabilidad de transición cuadrupolar reducida entre el primer estado  $2^+$  y el fundamental para los isótopos  $^{144-154}\text{Nd}$ . Los círculos azules corresponden con los valores teóricos mientras que los puntos rojos con los experimentales. Éstos últimos están extraídos de las referencias [21, 16].

figuras (fig. 8.4-8.5).

A continuación presentamos los resultados para los observables calculados con las funciones de onda colectivas mostradas anteriormente. Una de las pruebas más evidentes de la existencia de una transición de forma en los núcleos de neodimio es el comportamiento del cociente de las energías de los primeros estados  $4^+$  y  $2^+$  ( $R_{4/2} = E(4^+)/E(2^+)$ ) a lo largo de la cadena isotópica. Este cociente varía desde el valor correspondiente a vibraciones alrededor de una forma esférica ( $R_{4/2} = 2$ ) hasta el valor característico de las excitaciones de un rotor ( $R_{4/2} = 3.33$ ). En la figura (fig. 8.6(a)) se muestra que estos límites se cumplen experimentalmente en los núcleos  $^{144}\text{Nd}$  y  $^{152-156}\text{Nd}$  respectivamente, existiendo una transición suave entre ambos. Comparando estos datos con los cálculos vemos que existe un buen acuerdo entre los resultados, especialmente en la descripción de los límites vibracional

y rotacional. No obstante, apreciamos en la figura que la transición entre los núcleos esféricos y bien deformados es más abrupta en los cálculos que en los datos experimentales, y sólo el isótopo  $^{148}\text{Nd}$  podría considerarse como un núcleo transicional. Una conclusión parecida se puede extraer de los valores de la  $B(E2, 2^+ \rightarrow 0^+)$  mostradas en la figura (fig 8.6(b)). En este caso vemos que la probabilidad de transición aumenta con el número másico tanto teórica como experimentalmente. Este resultado es razonable ya que a medida que crece el número de neutrones el sistema se va alejando del cierre de capas  $N = 82$  y los efectos colectivos serán más importantes. Por último, vemos de nuevo que los cálculos muestran una transición abrupta que no se aprecia en los datos experimentales, siendo el isótopo  $^{148}\text{Nd}$  el núcleo transicional.

En la figura (fig. 8.7) comparamos los resultados teóricos con los experimentales de las energías de los estados excitados hasta un momento angular  $J = 8$ , normalizadas con la energía del estado  $2^+$  [21, 16]. Aquí vemos que los espectros experimentales en los isótopos  $^{144}\text{Nd}$  y  $^{152-154}\text{Nd}$ , correspondientes a los límites esférico y con deformación prolada respectivamente, se reproducen muy bien con los cálculos del generador de coordenadas. Además, observamos que los resultados se ajustan a las predicciones analíticas de los modelos  $U(5)$  y  $SU(3)$ . En estos límites, la resolución del hamiltoniano colectivo produce un espectro de excitación vibracional  $E(J) \sim J$  y rotacional  $E(J) \sim J(J+1)$  respectivamente. Sin embargo, para los núcleos transicionales  $^{146-150}\text{Nd}$  se aprecian ciertas desviaciones entre la teoría y el experimento. En el caso del isótopo  $^{146}\text{Nd}$  las predicciones teóricas (espectro de tipo vibracional) están por debajo de los valores experimentales mientras que ocurre lo contrario para los núcleos  $^{148-150}\text{Nd}$  (espectros rotacionales en los cálculos), donde se encuentra el mayor desacuerdo. Precisamente en esta región de transición es donde se observaba en la figura (fig. 8.3) que los efectos triaxiales tienen una influencia mayor.

Además, se muestran en la (fig. 8.7) las predicciones del modelo  $X(5)$ , donde se comparan con los datos experimentales para el isótopo  $^{150}\text{Nd}$ . Aquí vemos que el acuerdo es muy bueno y por ello se ha propuesto que dicho núcleo es el punto crítico experimental [16]. No obstante, en los cálculos microscópicos del generador de coordenadas axial con la interacción de Gogny, el núcleo  $^{150}\text{Nd}$  tiene un espectro claramente rotacional, aunque, a partir de la figura (fig. 8.3(d)), se puede ver que el grado de libertad triaxial puede jugar un papel importante en dichos isótopos. Además, en la parte de baja energía de los espectros experimentales de los isótopos  $^{146-150}\text{Nd}$  se observan estados  $J^\pi = 3^-$  y  $J^\pi = 1^-$  [21] con lo que el grado de libertad octupolar, ignorado tanto en estos cálculos que preservan la paridad como en el modelo colectivo,

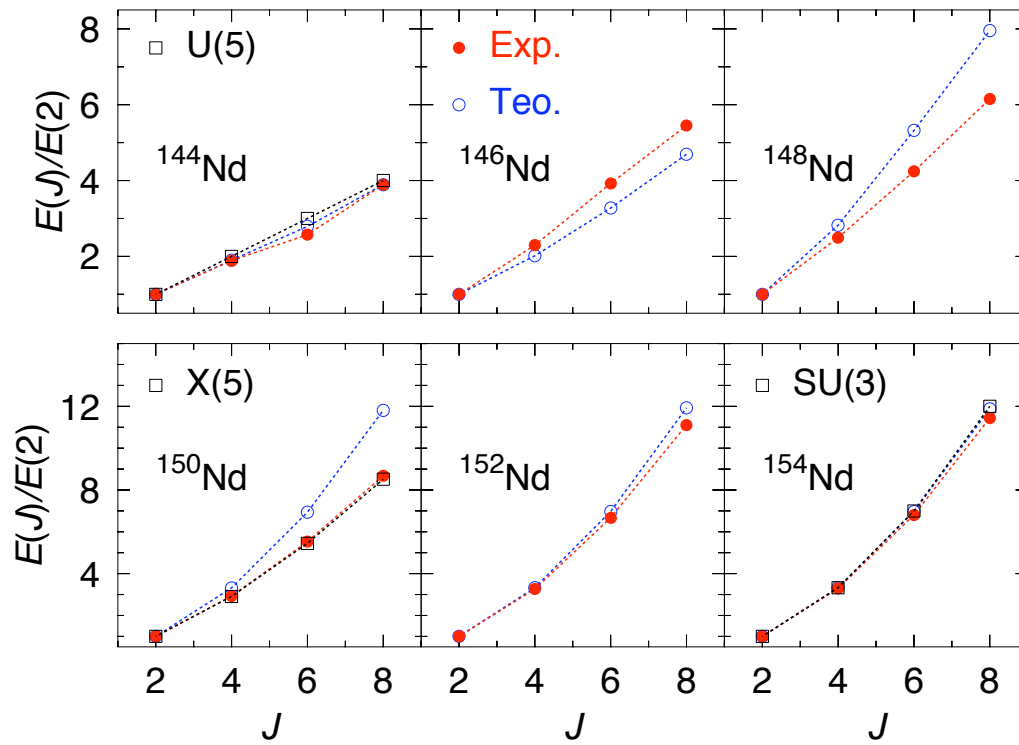


Figura 8.7: Energías de excitación normalizadas  $E(J_1^+)/E(2_1^+)$  para los isótopos  $^{144-154}\text{Nd}$ . Los datos teóricos y experimentales están representados con círculos azules y puntos rojos respectivamente. Además, para los núcleos  $^{144}\text{Nd}$ ,  $^{150}\text{Nd}$  y  $^{154}\text{Nd}$  se muestran las predicciones de los modelos U(5), X(5), SU(3) respectivamente (cuadrados negros). Nótese el cambio de escala entre el panel superior e inferior.

puede ser también relevante en esta región [22]. Es importante destacar que la interacción de Gogny usada en nuestros cálculos es capaz de reproducir razonablemente bien estos estados octupolares [22]. De todo ello se concluye que la transición de fase en el modelo microscópico no es puramente cuadrupolar axial sino que más bien sigue una trayectoria en el triángulo de Casten como la marcada por la línea roja en la figura (fig. 8.1). Este hecho ya se podía inferir del análisis de las superficies de energía potencial (sec. 8.1). Por tanto, sólo cuando se incluyan los grados de libertad relevantes que faltan en el sistema se podrán analizar de manera adecuada la simetría  $X(5)$  desde un punto de vista microscópico.

Recientemente, Nikšić y colaboradores han calculado las propiedades espectroscópicas del núcleo  $^{150}\text{Nd}$  con un método más allá de campo medio axial muy parecido al que se presenta en este trabajo [23]. Estos cálculos se efectúan con un lagrangiano relativista (interacción PC-F1) y las funciones de onda intrínsecas se obtienen en la aproximación de Lipkin-Nogami+BCS. Además, en el método del generador de coordenadas sólo se consideran configuraciones con deformación prolada axial. A pesar de las restricciones que imponen las simetrías, el método empleado (LN+BCS) y de las propias limitaciones que tiene la interacción (la predicción de un estado fundamental esférico en lugar de deformado para el núcleo  $^{32}\text{Mg}$  es un ejemplo [24]), estos autores obtienen un acuerdo excelente con los datos experimentales para el núcleo  $^{150}\text{Nd}$  y con las predicciones de la simetría  $X(5)$ , no sólo en las energías de excitación de las bandas *yrast* e *yrare* sino también con las probabilidades de transición. De esta comparación favorable, en la referencia [23] se colige que *se ha conseguido describir microscópicamente no sólo los rasgos principales de la transición de forma sino también las propiedades específicas en el punto crítico*. Desde nuestro punto de vista, tal afirmación debe comentarse. En primer lugar, el acuerdo con el experimento no es tan bueno en los núcleos vecinos  $^{148,152}\text{Nd}$  y los límites vibracional y rotacional no se presentan, con lo que no se puede concluir que la transición está completamente descrita. Por otro lado, no se explora el grado de libertad triaxial ni se estudia su posible influencia, que, como hemos visto en la sección (sec. 8.1) puede ser determinante en la región transicional. Por último, el hecho de considerar en este cálculo únicamente la parte prolada no está en absoluto justificado y puede alterar el resultado final de manera significativa, como vamos a analizar a continuación.

En la figura (fig. 8.8) se representan las energías de excitación normalizadas del núcleo  $^{148}\text{Nd}$  calculadas con el generador de coordenadas usando sólo los estados prolados (puntos morados) y empleando todos los estados

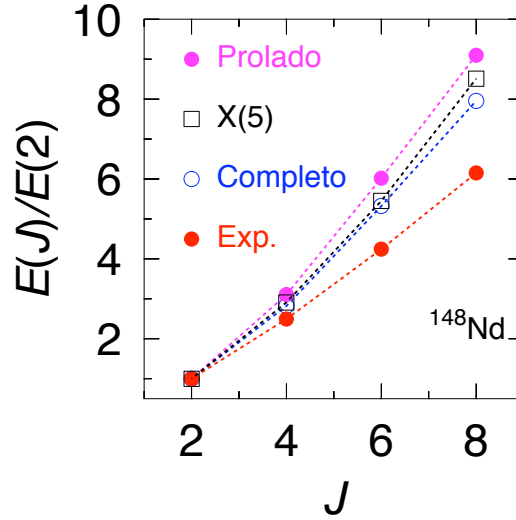


Figura 8.8: Energías de excitación normalizadas  $E(J_1^+)/E(2_1^+)$  para el isótopo  $^{148}\text{Nd}$  calculadas con el método del generador de coordenadas con la interacción de Gogny usando sólo la parte prolada (puntos morados) y permitiendo la mezcla de la parte oblada y prolada como en los cálculos estándar (puntos azules). Además se muestran la predicción del modelo X(5) (cuadrados negros) y los datos experimentales (círculos rojos).

axiales, tanto prolados como oblados (puntos azules). Además, se representan los valores de la simetría X(5) y los datos experimentales. De esta figura se pueden observar varios aspectos importantes. En primer lugar, notamos la coincidencia entre los cálculos axiales que incluyen todo el rango de  $\beta$  con la predicción del modelo X(5). Este hecho prueba que el espectro que predice dicha simetría puede reproducirse con un cálculo completamente axial, aunque la superficie de energía de potencial correspondiente no tenga la forma dada para el modelo X(5) (veánse las figs. 8.2(c),(g) y 8.3(c),(g)). Por ello, también se puede esperar que, si se introducen los grados de libertad relevantes en el cálculo del espectro del núcleo  $^{150}\text{Nd}$ , se pueda obtener un buen acuerdo con el experimento sin necesidad de pasar por la simetría crítica. Este hecho se representa pictóricamente por la línea roja de la figura (fig. 8.1).

Por otro lado, observamos que, si obviamos la parte oblada del cálculo del generador, como en la referencia [23], los resultados se ven afectados de manera significativa, obteniéndose, como es natural, un espectro más rotacional. Esto prueba que, al menos con la interacción de Gogny, las conclusiones que se puedan extraer de cálculos efectuados ignorando o no la parte oblada en

los núcleos transicionales (y más aún en los núcleos esféricos) son completamente diferentes, y pone en duda el procedimiento empleado en la referencia [23] y la confianza en tales resultados.

### 8.3. Resumen

En este capítulo hemos estudiado la transición de forma entre núcleos esféricos y con deformación prolada en los isótopos de neodimio  $^{144-154}\text{Nd}$  con cálculos más allá de campo medio con la interacción de Gogny. Para ello se han analizado las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas en el plano  $(\beta, \gamma)$  y se han comparado con los potenciales correspondientes a una transición puramente axial esférico-prolado en el modelo colectivo. Los cálculos microscópicos reproducen la transición (el núcleo  $^{144}\text{Nd}$  es prácticamente esférico mientras que los núcleos  $^{152-154}\text{Nd}$  están bien deformados) y se observa que el grado de libertad triaxial juega un papel relevante en la región donde se produce propiamente la transición ( $^{146-150}\text{Nd}$ ), en contraste con los resultados del modelo colectivo.

Asimismo, se han determinado los espectros de excitación con el método del generador de coordenadas con proyección a buen número de partículas y momento angular de funciones de onda con simetría axial. La comparación con los datos experimentales es buena en los límites vibracional y rotacional, mientras que los cálculos no son capaces de reproducir cuantitativamente la zona de transición. De hecho, se observa que la transición se produce de manera más abrupta en la teoría que en los datos experimentales. Lamentablemente, a la vista de los resultados presentados en las figuras (figs. 8.6-8.7) se quedan sin responder algunas de las cuestiones más relevantes con las que hemos iniciado este capítulo: ¿es la transición de forma que se observa en los isótopos de neodimio causada por el grado de libertad  $\beta$  y es el  $^{150}\text{Nd}$  la realización experimental del punto crítico X(5)? Los modelos algebraicos y los cálculos de Nikšić y colaboradores [23] predicen que sí es posible describir dicha transición y el punto crítico. No obstante, si un núcleo transicional es *blando* con respecto a un grado de libertad, en principio se espera que también lo sea frente a otros. Así lo demuestran tanto los resultados experimentales para el grado de libertad octupolar (reproducidos teóricamente con la interacción de Gogny [22]), como los cálculos de las superficies  $(\beta, \gamma)$  presentados en esta memoria.

La otra pregunta relevante es si las interacciones ajustadas globalmente a toda la tabla de núcleos y a nivel de campo medio, son capaces de reproducir fenómenos tan sensibles como la descripción en detalle de una



transición de fase, con un grado de exactitud mayor que la presentada en las figuras (figs. 8.6-8.7). De nuevo Nikšić y colaboradores responden afirmativamente a esta cuestión [23], a pesar de que los mismos autores alertan sobre la necesidad de un ajuste de interacción usada en sus cálculos para ser capaces de reproducir aspectos mucho menos específicos de estructura nuclear que una transición, como la deformación del estado fundamental del  $^{32}\text{Mg}$  [24]. Sin embargo, nuestros resultados con la interacción de Gogny muestran que los detalles finos de las transiciones de forma en estos núcleos se podrán estudiar con los cálculos más allá de campo medio cuando se incluyan de manera adecuada efectos triaxiales, octupolares y, probablemente, deformaciones de orden superior. Si este análisis futuro se concluye con un buen acuerdo con los datos experimentales, se deberán replantear las interpretaciones acerca de la realización experimental del punto crítico X(5) en el núcleo  $^{150}\text{Nd}$ . En el caso de que no se logre tal acuerdo, se deberá concluir que la interacción de Gogny en su parametrización actual no tiene la resolución suficiente como para describir los detalles finos de las transiciones de forma en los isótopos de neodimio.

## Referencias

- [1] F. Iachello, A. Arima, *The Interacting Boson Model* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1987)
- [2] O. Scholten, F. Iachello, A. Arima, Ann. Phys. (N.Y.) 115, 325 (1978)
- [3] O. Castanos, A. Frank, P. Federman, Phys. Lett. B 88, 203 (1979)
- [4] J. B. Gupta, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 21, 565 (1995)
- [5] F. Iachello, N.V. Zamfir, R.F. Casten, Phys. Rev. Lett. 81, 1191 (1998)
- [6] R. Fossion, C. De Coster, J. E. García-Ramos, T. Werner, K. Heyde Nucl. Phys. A 697, 703 (2002)
- [7] J. E. García-Ramos, J. M. Arias, J. Barea, A. Frank , Phys. Rev. C 68, 024307 (2003)
- [8] N. Turkan, I. Inci, Phys. Scr. 75, 515 (2007)
- [9] A. Bohr, Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk Selsk. 26, 14 (1952)
- [10] A. E. L. Dieperink, O. Scholten, F. Iachello, Phys. Rev. Lett. 44, 1747 (1980)
- [11] P. Ring,, P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [12] F. Iachello, Phys. Rev. Lett. 85, 3580 (2000)
- [13] F. Iachello, Phys. Rev. Lett. 87, 052502 (2001)
- [14] J. Jolie, P. Cejnar, R. F. Casten, S. Heinze, A. Linnemann, V. Werner, Phys. Rev. Lett. 89, 182502 (2002)
- [15] R. F. Casten, N. V. Zamfir Phys. Rev. Lett. 87, 052503 (2001)
- [16] R. Krücken, B. Albanna, C. Bialik, R. F. Casten, J. R. Cooper, A. Dewald, N. V. Zamfir, C. J. Barton, C. W. Beausang, M. A. Caprio, A. A. Hecht, T. Klug, J. R. Novak, N. Pietralla, P. von Brentano, Phys. Rev. Lett. 88, 232501 (2002)
- [17] R. F. Casten, N. V. Zamfir Phys. Rev. Lett. 85, 3584 (2000)
- [18] J. Decharge, M. Girod, D. Gogny, Phys. Lett. B 55, 361 (1975)

## Referencias

---

- [19] J. Meng, W. Zhang, S. G. Zhou, H. Toki, L. S. Geng, Eur. Phys. J. A 25, 23 (2005)
- [20] R. Fossion, Dennis Bonatsos, G. A. Lalazissis , Phys. Rev. C 73, 044310 (2006)
- [21] Evaluated Nuclear Structure Data File,  
<http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>
- [22] E. Garrote, J.L. Egido, L.M. Robledo, Phys. Rev. Lett. 80, 4398 (1998)
- [23] T. Nikšić, D. Vretenar, G. A. Lalazissis, P. Ring, Phys. Rev. Lett. 99, 092502 (2007)
- [24] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring, Phys. Rev. C 73, 034308 (2006)



## Capítulo 9

# Conclusiones generales y perspectivas

El método GCM con funciones de intrínsecas VAP proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular proporciona un marco teórico robusto para estudiar las propiedades de los núcleos atómicos desde un punto de vista microscópico, variacional y autoconsistente. Además, no está limitado a espacios de configuración pequeños y, ya que la interacción fenomenológica efectiva que usamos es prácticamente universal, tampoco está limitado a ninguna región concreta de la tabla de núcleos. En esta memoria se han presentado los principales aspectos del método y los resultados que se han obtenido tanto en el análisis de aspectos formales como en el estudio de sistemas físicos.

En este trabajo se han comparado, en el marco de la proyección a buen número de partículas, distintos métodos que se distinguen por el espacio variacional con el que se hallan las funciones de onda intrínsecas de tipo producto que se proyectan. En particular, se han estudiado las diferencias entre los métodos PAV (proyección después de la variación de funciones de onda HFB), PLN (proyección después de la variación de funciones de onda Lipkin-Nogami), RVAP (proyección después de la variación de funciones de funciones de onda constreñidas en los grados de libertad relevantes) y el método VAP (variación después de la proyección), extrayéndose las siguientes conclusiones:

- El método VAP proporciona la mejor aproximación variacional a la energía exacta del problema.
- Los métodos RVAP se pueden aproximar a la solución VAP si se exploran los grados de libertad relevantes en el sistema, siendo, en el caso la

proyección a buen número de partículas, las fluctuaciones y momentos superiores del número de partículas dichos grados de libertad .

- El método de Lipkin-Nogami proyectado (PLN) es una aproximación a una variación después de la proyección restringida (RVAP) que explora únicamente las fluctuaciones en el número de partículas ( $\Delta N^2, \Delta Z^2$ ).
- Los métodos PAV y PLN no son capaces de incluir adecuadamente correlaciones de apareamiento en las regiones donde la densidad de niveles alrededor de la energía de Fermi es pequeña así como en las zonas donde el nivel de Fermi pase por un cruce de niveles. En particular, el método PAV incluso presenta transiciones de fase espurias (normal-conductor a superconductor).

Posteriormente, se han mostrado los aspectos más importantes tanto de la proyección a buen momento angular como del GCM con funciones de onda proyectadas y el momento cuadrupolar axial como la coordenada generadora. En estos casos se hacen patentes de nuevo las diferencias que existen entre las distintas aproximaciones que se usan para hallar las funciones de onda intrínsecas de tipo producto, estableciéndose el GCM con funciones VAP como el que más se aproxima a los resultados experimentales. Además, se ha mostrado la relevancia de la proyección a buen número de partículas en los cálculos del generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas a buen momento angular, tanto en la ganancia que se obtiene en la energía como en la mejora de la convergencia.

A continuación, el método más allá de campo medio que se ha propuesto en este trabajo se ha utilizado para investigar los posibles cierres de capas en  $N = 32$  y/o  $N = 34$  en los isótopos de calcio, titanio y cromo,  $N = 40$  en los isótopos de cromo y la degradación del cierre  $N = 28$  en los isótopos de silicio. En estos estudios se ha obtenido un buen acuerdo cualitativo entre los resultados teóricos y los datos experimentales accesibles hasta el momento para las energías de separación de dos neutrones, las energías de excitación de los primeros estados excitados y las probabilidades de transición cuadrupolar entre el estado fundamental y el primer estado  $2^+$ . Todo ello ha permitido inferir que  $N = 32$  es un cierre de capas mientras que  $N = 34$  no lo es en los isótopos estudiados. Asimismo, se ha determinado que los núcleos  $^{66}\text{Cr}_{40}$  y  $^{42}\text{Si}_{28}$  son deformados, con lo que tampoco se tienen cierres de capas en  $N = 40$  y  $N = 28$  para dichos isótopos.

Por último, se ha analizado la transición de forma esférica-prolada que aparece experimentalmente en la cadena isotópica  $^{144-154}\text{Nd}$ . Los cálculos de

---

las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas en el plano  $(\beta, \gamma)$  muestran cualitativamente la existencia de una transición de forma en esta zona, jugando el grado de libertad triaxial un papel relevante en los núcleos donde se produce dicha transición. Esto contrasta con los modelos colectivos en los que la transición de forma es puramente axial en la dirección positiva de la deformación cuadrupolar. Los cálculos microscópicos realizados con el generador de coordenadas con funciones de onda axiales proyectadas a buen número de partículas y momento angular describen los límites vibracional y rotacional pero no la región de transición. Este desacuerdo con los datos experimentales se achaca a la ausencia de los grados de libertad relevantes en esta zona como la triaxialidad o la octupolaridad.

Como se ha podido apreciar a lo largo de esta memoria, a pesar de la complejidad y riqueza que tiene la función de onda que se obtiene con el método implementado en este trabajo, los resultados teóricos reproducen sólo cualitativamente las tendencias de los datos empíricos. Sin embargo, para conseguir un acuerdo cuantitativo se debe ir más allá del alcance de esta tesis e introducir un conjunto de mejoras que marcan el camino para trabajos futuros. Podemos establecer dos causas como principales fuentes del desacuerdo con los datos experimentales que, como se trató en el capítulo 2, están íntimamente unidas: la calidad de la función de onda que describe el sistema y la calidad de la interacción nucleón-nucleón efectiva.

Por tanto, los pasos a seguir para mejorar el método expuesto en esta memoria serán los siguientes:

- La realización de la proyección a buen número de partículas y momento angular completamente triaxial. Con ello se podrán describir adecuadamente los estados con  $J \neq 0$  que se ven afectados en mayor medida por las mezclas de  $K$ . En esta extensión estamos trabajando actualmente.
- La ruptura de la simetría de paridad espacial que, con la subsiguiente proyección simultánea a buen número de partículas, momento angular y paridad sea capaz de describir estados con paridad negativa y de explorar el grado de libertad octupolar.
- La inclusión de estados de más cuasipartículas, con lo que se podrán describir también núcleos impares.
- Aumentar el espacio variacional de funciones de onda proyectadas. El método ideal consistiría en realizar una variación después de la proyección triaxial para cada valor del momento angular para encontrar las funciones de onda intrínsecas de tipo producto. Además, este método

daría automáticamente los valores correctos para los momentos de inercia. Sin embargo, este proceso es enormemente costoso desde el punto de vista computacional y, por tanto, la solución asequible pasa por realizar una variación antes de la proyección restringida, explorando las superficies de energía potencial proyectadas a buen momento angular en los grados de libertad relevantes del sistema (deformaciones de orden multipolar más bajo). Además, este procedimiento se puede optimizar, por ejemplo, proyectando estados que sean solución del hamiltoniano de *cranking*. Las ventajas que tienen dichos estados intrínsecos es que rompen la simetría autoconsistente de inversión temporal y, además, es una aproximación a la función de onda VAP en el momento angular en el límite de grandes deformaciones, con lo que se mejorarían los momentos de inercia.

- Con respecto al aumento del espacio no-ortonormal de funciones proyectadas en el que se resuelve la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin, se pueden considerar dos mejoras. Por un lado, en los casos en los que las superficies de energía potencial proyectadas sean planas en determinadas direcciones, resultaría conveniente realizar el cálculo del generador de coordenadas en más de una dimensión usando más de una coordenada generatriz. Por otro, en un futuro se podrían incluir dentro del cálculo GCM funciones de onda intrínsecas construidas a partir de estados de dos o más cuasipartículas que permitieran describir también excitaciones monoparticulares.
- En relación con la interacción fenomenológica efectiva que se usa, existen una serie de cambios que se podrían incluir. En primer lugar, se puede explorar la introducción de nuevos términos en la fuerza, como un término tensor, así como modificar otros existentes, como hacer de rango finito los términos de espín-órbita y el término dependiente de la densidad, en el contexto de las teorías que van más allá del campo medio. Por otro lado, tanto la introducción de nuevos términos o la modificación de otros, así como el uso de los métodos más allá de campo medio, demandan un reajuste de los parámetros de la interacción, ya que éstos están ajustados a nivel de campo medio. Por tanto, independientemente de la realización de un cambio funcional de la fuerza, sería conveniente tener un ajuste que tenga en cuenta efectos más allá de campo medio, como las correcciones rotacionales o la energía de apareamiento que evite la aparición de exceso de energía de ligadura en ciertas regiones.



---

Actualmente, las mejoras que se pueden introducir a corto plazo y que probablemente tengan mayor influencia en la calidad de los resultados son la proyección a buen momento angular triaxial de funciones de onda de *cranking* y la exploración de nuevos grados de libertad en el espíritu de las aproximaciones RVAP y del GCM multidimensional, dejando como último paso los cambios en la interacción una vez que se haya explotado al máximo el desarrollo de las técnicas más allá de campo medio con las fuerzas existentes.



# Apéndice A

## Cálculo de solapes GCM

En este apéndice se mostrará el cálculo de los solapes que aparecen en evaluación de los elementos de matriz con funciones de onda proyectadas y/o GCM. Para ello se hará uso del teorema de Wick generalizado [1, 2, 3]. Además, aquí se emplearán bases completas en el sentido de que los estados transformados por una determinada simetría están dentro del espacio de Hilbert considerado en el problema. Para el cálculo con bases incompletas se pueden consultar las referencias (Ref. [4, 5]).

Nuestro propósito consiste en calcular los siguientes elementos de matriz:

$$\frac{\langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{M}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{M}} | \Phi(q') \rangle} \quad (\text{A.1})$$

En primer lugar hacemos las siguientes consideraciones:

- Los estados  $|\Phi(q)\rangle$ ,  $|\Phi(q')\rangle$  son funciones tipo HFB que cumplen:

$$\begin{aligned} \beta_k(q) |\Phi(q)\rangle &= 0 \quad \forall k \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta(q) \\ \beta^\dagger(q) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U^\dagger(q) & V^\dagger(q) \\ V^T(q) & U^T(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \beta_k(q') |\Phi(q')\rangle &= 0 \quad \forall k \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta(q') \\ \beta^\dagger(q') \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U^\dagger(q') & V^\dagger(q') \\ V^T(q') & U^T(q') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

- La transformación  $\hat{\mathcal{M}}$  cumple las siguientes propiedades:

$$\hat{\mathcal{M}}\{c_i^\dagger, c_j\}\hat{\mathcal{M}}^\dagger = \delta_{ij} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{M}}c_i^\dagger\hat{\mathcal{M}}^\dagger &= \sum_j M_{ji}c_j^\dagger \\ \hat{\mathcal{M}}c_i\hat{\mathcal{M}}^\dagger &= \sum_j M_{ji}^*c_j \\ \hat{\mathcal{M}}\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}\hat{\mathcal{M}}^\dagger &= \begin{pmatrix} M^\dagger & 0 \\ 0 & M^T \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \\ M_{ij} &= \langle i|\hat{\mathcal{M}}|j\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\hat{\mathcal{M}}^\dagger\hat{\mathcal{M}} = \hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{M}}^\dagger = 1 \quad (\text{A.6})$$

- Se puede definir el estado siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{M}}|\Phi(q')\rangle &= |\tilde{\Phi}(q')\rangle \Rightarrow \tilde{\beta}_k(q')|\tilde{\Phi}(q')\rangle = 0 \quad \forall k \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{\beta}(q') \\ \tilde{\beta}^\dagger(q') \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \tilde{U}^\dagger(q') & \tilde{V}^\dagger(q') \\ \tilde{V}^T(q') & \tilde{U}^T(q') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

- El operador  $\hat{\mathcal{O}}$  es un producto de operadores de creación y destrucción de partículas y cuasipartículas:

$$\hat{\mathcal{O}} = abc\dots yz\dots \quad (\text{A.8})$$

donde estos operadores pueden ser cualquiera de los definidos arriba ( $x = (c_i, c_i^\dagger, \beta_i^\dagger(q), \beta_i(q), \beta_i^\dagger(q'), \beta_i(q'), \tilde{\beta}_i^\dagger(q), \tilde{\beta}_i(q))$ ).

Con estas consideraciones, se puede aplicar el teorema de Wick generalizado en el cálculo del solape (ec. A.1) [2]:

$$\frac{\langle \Phi(q)|\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{M}}|\Phi(q')\rangle}{\langle \Phi(q)|\hat{\mathcal{M}}|\Phi(q')\rangle} = \frac{\langle \Phi(q)|abc\dots xyz|\tilde{\Phi}(q')\rangle}{\langle \Phi(q)|\tilde{\Phi}(q')\rangle} \quad (\text{A.9})$$

Este teorema permite calcular los valores esperados de un producto de operadores de creación y/o destrucción  $abc\dots xyz$  entre estados con el mismo o distinto vacío de cuasipartículas como la suma de productos de todas las

---

posibles contracciones de dos operadores de creación y/o destrucción:

$$\frac{\langle \Phi(q) | abc \dots xyz | \tilde{\Phi}(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | \tilde{\Phi}(q') \rangle} = [ab] \cdot \dots \cdot [yz] \pm \dots \pm [ac] \cdot \dots \cdot [yz] \pm \dots \quad (\text{A.10})$$

Para ello se definen las contracciones de dos operadores de creación y/o destrucción  $xy$  como:

$$[xy] = \frac{\langle \Phi(q) | xy | \tilde{\Phi}(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | \tilde{\Phi}(q') \rangle} \quad (\text{A.11})$$

Para calcular las contracciones más relevantes previamente definimos la transformación  $\hat{\mathcal{T}}$  que relaciona los vacíos de cuasipartículas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{M}} |\Phi(q')\rangle &= |\tilde{\Phi}(q')\rangle \equiv \hat{\mathcal{T}} |\Phi(q)\rangle \\ \hat{\mathcal{T}} &= \hat{\mathcal{M}} \hat{\mathcal{T}}_{q \rightarrow q'} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Con estas relaciones se cumple que:

$$\begin{pmatrix} \beta(q) \\ \beta^\dagger(q) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\beta}(q') \\ \tilde{\beta}^\dagger(q') \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

y además se tiene que:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\beta}(q') \\ \tilde{\beta}^\dagger(q') \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{T}} \begin{pmatrix} \beta(q) \\ \beta^\dagger(q) \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}}^{-1} \quad (\text{A.14})$$

A partir de estas últimas expresiones y con un poco de álgebra sencillo se obtiene finalmente:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger(q) & V^\dagger(q) \\ V^T(q) & U^T(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & M^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(q') & V^*(q') \\ V(q') & U^*(q') \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

Con esta matriz (ec. A.15) se pueden expresar las contracciones básicas de manera compacta (véase [2]):

$$\langle \Phi(q) | \beta_l(q) \beta_{l'}(q) [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = - (T_{12} T_{22}^{-1})_{ll'} \quad (\text{A.16})$$

$$\langle \Phi(q) | \tilde{\beta}_l^\dagger(q) \tilde{\beta}_{l'}^\dagger(q) [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = - (T_{22}^{-1} T_{21})_{ll'} \quad (\text{A.17})$$

$$\langle \Phi(q) | [\hat{\mathcal{M}}] \beta_l^\dagger(q) \beta_{l'}^\dagger(q) | \Phi(q') \rangle = - (T_{22}^{-1} T_{21})_{ll'} \quad (\text{A.18})$$

$$\langle \Phi(q) | \beta_l(q) \tilde{\beta}_{l'}^\dagger(q') [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = (T_{22}^T)_{ll'}^{-1} \quad (\text{A.19})$$

$$[\hat{\mathcal{M}}] \equiv \frac{\hat{\mathcal{M}}}{\langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{M}} | \Phi(q') \rangle} \quad (\text{A.20})$$

Usando las expresiones anteriores se pueden determinar la matriz densidad y los tensores de apareamiento generalizados:

$$\rho_{ll'}^{10} \equiv \langle \Phi(q) | c_{l'}^\dagger c_l [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = (M V^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q))_{ll'} \quad (\text{A.21})$$

$$\kappa_{ll'}^{10} \equiv \langle \Phi(q) | c_{l'} c_l [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = (M V^*(q') T_{22}^{-1} U^T(q))_{ll'} \quad (\text{A.22})$$

$$\kappa_{ll'}^{01} \equiv \langle \Phi(q) | c_l^\dagger c_{l'}^\dagger [\hat{\mathcal{M}}] | \Phi(q') \rangle = - (M^* U^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q))_{ll'} \quad (\text{A.23})$$

Estas cantidades son muy importantes ya que permiten expresar los valores esperados de cualquier operador en función de ellas. Sin embargo, todavía queda por determinar el valor de la norma. Para ello asumimos que el operador unitario  $\hat{\mathcal{M}}$  se expresa como:

$$\hat{\mathcal{M}} = e^{-i\hat{\mathcal{S}}} \quad \hat{\mathcal{S}} = \sum_{ij} S_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (\text{A.24})$$

donde  $\hat{\mathcal{S}}$  es un operador hermítico y  $S_{ij} = \langle i | \hat{\mathcal{S}} | j \rangle$ . De esta manera, la norma se calcula con la siguiente expresión (fórmula de Onishi) [6, 2, 3, 1]:

$$\langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{M}} | \Phi(q') \rangle = \langle \Phi(q) | e^{-i\hat{\mathcal{S}}} | \Phi(q') \rangle = \pm e^{\frac{-i}{2} \text{Tr} \mathcal{S}} (\text{Det} [T_{22}])^{1/2} \quad (\text{A.25})$$

En la ecuación anterior vemos que hay un signo indeterminado debido a la raíz cuadrada. Existen distintos métodos generales para determinar este signo (continuación analítica [7, 8], método de Neergard [9]) aunque en este

trabajo se han utilizado las simetrías internas de las funciones de onda de tipo producto para hallarlo de manera unívoca.

A continuación vamos a usar las expresiones anteriores para el caso particular de las contracciones que aparecen en los cálculos del generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas a buen número de partículas y momento angular con simetría axial:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{O}} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} | \Phi(q') \rangle &= \\ \frac{\langle \Phi(q) | \hat{\mathcal{O}} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} | \Phi(q') \rangle} &\cdot \langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} | \Phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

En primer lugar identificamos el operador:

$$\hat{\mathcal{M}} = e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} \Rightarrow \hat{\mathcal{S}} = \beta \hat{J}_x - \varphi \hat{N} \quad (\text{A.27})$$

Los elementos de matriz correspondientes serán:

$$M_{ij} = \langle i | \hat{\mathcal{M}} | j \rangle = R_{ij}(\beta) e^{i\varphi} \quad (\text{A.28})$$

$$S_{ij} = \langle i | \hat{\mathcal{S}} | j \rangle = \beta (J_x)_{ij} - \varphi \delta_{ij} \quad (\text{A.29})$$

A continuación hallamos la matriz  $T_{22}$  sustituyendo las expresiones anteriores en la ecuación (ec. A.15):

$$T_{22}(q, q', \beta, \varphi) = e^{i\varphi} V^T(q) R(\beta) V^*(q') + e^{-i\varphi} U^T(q) R^*(\beta) U^*(q') \quad (\text{A.30})$$

A partir de las ecuaciones (ecs. A.29, A.30 y A.25) obtenemos la expresión para la norma:

$$\begin{aligned} n(q, q', \beta, \varphi) &\equiv \langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} | \Phi(q') \rangle \\ &= \left( e^{i[\beta \text{Tr}(J_x) - \varphi \text{Tr}(1)]} \text{Det} [T_{22}(q, q', \beta, \varphi)] \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Por último, hallamos la matriz densidad y los tensores de apareamiento generalizados para este caso:

$$\begin{aligned} \rho_{ll'}^{10}(q, q', \beta, \varphi) &= \langle \Phi(q) | c_l^\dagger c_{l'} \left[ e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} \right] | \Phi(q') \rangle \\ &= \left( e^{i\varphi} R(\beta) V^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q) \right)_{ll'} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned}
\kappa_{ll'}^{10}(q, q', \beta, \varphi) &= \langle \Phi(q) | c_{l'} c_l \left[ e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} \right] | \Phi(q') \rangle \\
&= \left( e^{i\varphi} R(\beta) V^*(q') T_{22}^{-1} U^T(q) \right)_{ll'} \quad (A.33)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\kappa_{ll'}^{01}(q, q', \beta, \varphi) &= \langle \Phi(q) | c_l^\dagger c_{l'}^\dagger \left[ e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi \hat{N}} \right] | \Phi(q') \rangle \\
&= - \left( e^{-i\varphi} R^*(\beta) U^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q) \right)_{ll'} \quad (A.34)
\end{aligned}$$

Estas expresiones se simplifican en los siguientes casos:

- No haya generador de coordenadas ( $q = q'$ ).
- No haya proyección a buen momento angular ( $\beta = 0$ ).
- No haya proyección a buen número de partículas ( $\varphi = 0$ ).

El caso en el que se cumplen los tres puntos anteriores es el HFB. Aquí las expresiones se simplifican quedando:

$$T_{22} = V^T V^* + U^T U^* = 1 \quad (A.35)$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (A.36)$$

$$\rho_{ll'}^{10} = \langle \Phi | c_{l'}^\dagger c_l | \Phi \rangle = (V^* V^T)_{ll'} \quad (A.37)$$

$$\kappa_{ll'}^{10} = \langle \Phi | c_{l'} c_l | \Phi \rangle = (V^* U^T)_{ll'} \quad (A.38)$$

$$\kappa_{ll'}^{01} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_{l'}^\dagger | \Phi \rangle = - (U^* V^T)_{ll'} \quad (A.39)$$

que se corresponden con las expresiones mostradas en la sección 4.1 del capítulo 1.

## Referencias

- [1] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [2] R. Balian, E. Brezin, *Nuovo Cimento* 64, 37 (1969)
- [3] K. Hara, S. Iwasaki, *Nucl. Phys. A* 332, 61 (1979)



## Referencias

---

- [4] L. M. Robledo, Phys. Rev. C 50, 2874 (1994)
- [5] J. L. Egido, L. M. Robledo, Y. Sun, Nucl. Phys. A 560, 253 (1993)
- [6] N. Onishi and S. Yoshida, Nucl. Phys. 80, 367 (1966)
- [7] K. Hara, A. Hayashi, P. Ring, Nucl. Phys. A 385, 14 (1982)
- [8] K. Enami, K. Tanabe, N. Yoshinaga, Phys. Rev. C 59, 135 (1999)
- [9] K. Neergård, E. Wüst, Nucl. Phys. A 402, 311 (1983)



## Apéndice B

# Cálculo de valores esperados con funciones GCM

En este apéndice, haciendo uso de los resultados obtenidos en el apéndice A, se calcularán los valores esperados de los operadores más relevantes en el marco del método GCM con funciones de onda proyectadas simultáneamente al número de partículas y momento angular.

### B.1. Parte GCM

Escribimos la función de onda GCM que describe el sistema de muchos cuerpos como:

$$|\Psi^{NZ;J;\sigma}\rangle = \int f^{NZ;J;\sigma} |\Phi^{NZ;J}(q)\rangle dq = \sum_k g_k^{NZ;J;\sigma} |k^{NZ;J}\rangle \quad (\text{B.1})$$

Como vimos en el capítulo 1, la base natural (ortonormal) está definida por los autoestados y los autovalores de la matriz de los solapes de la norma:

$$|k^{NZ;J}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k^{NZ;J}}} \int u_k^{NZ;J}(q) |\Phi^{NZ;J}(q)\rangle \quad (\text{B.2})$$

$$\int \mathcal{N}^{NZ;J}(q, q') u_k^{NZ;J}(q') dq' = n_k^{NZ;J} u_k^{NZ;J}(q) \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{N}^{NZ;J}(q, q') = \langle \Phi^{NZ;J}(q) | \Phi^{NZ;J}(q') \rangle \quad (\text{B.4})$$

Por otra parte, los coeficientes  $g^{NZ;J;\sigma}$  se hallan resolviendo la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin:

$$\sum_{k'} \langle k^{NZ;J} | \hat{H} | k'^{NZ;J} \rangle g_{k'}^{NZ;J;\sigma} = E^{NZ;J;\sigma} g_k^{NZ;J;\sigma} \quad (\text{B.5})$$

$$\langle k^{NZ;J} | \hat{H} | k'^{NZ;J} \rangle =$$

$$\int \left[ u_k^{NZ;J}(q) \right]^* \mathcal{H}^{NZ;J}(q, q') u_k^{NZ;J}(q') \frac{dq dq'}{\sqrt{n_k^{NZ;J} n_{k'}^{NZ;J}}} \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{H}^{NZ;J}(q, q') = \langle \Phi^{NZ;J}(q) | \hat{H} | \Phi^{NZ;J}(q') \rangle \quad (\text{B.7})$$

Considerando todo lo anterior, el valor esperado de cualquier operador  $\hat{O}$  entre estados de la forma dada en (ec. B.1) se expresa como<sup>1</sup>:

$$\langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} | \hat{O} | \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \sum_{k_1 k_2} \left[ g_{k_1}^{NZ;J_1;\sigma_1} \right]^* \langle k_1^{NZ;J_1} | \hat{O} | k_2^{NZ;J_2} \rangle g_{k_2}^{NZ;J_2;\sigma_2} \quad (\text{B.8})$$

donde el elemento de matriz entre los estados de la base natural es:

$$\langle k_1^{NZ;J_1;\sigma_1} | \hat{O} | k_2^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle =$$

$$\int \left[ u_{k_1}^{NZ;J_1}(q) \right]^* \mathcal{O}^{NZ;J_1 J_2}(q, q') u_{k_2}^{NZ;J_2}(q') \frac{dq dq'}{\sqrt{n_{k_1}^{NZ;J_1} n_{k_2}^{NZ;J_2}}} \quad (\text{B.9})$$

## B.2. Parte de la proyección a buen momento angular

Por tanto, tenemos que calcular los solapes siguientes:

$$\mathcal{O}^{NZ;J_1 J_2}(q, q') = \langle \Phi^{NZ;J_1}(q) | \hat{O} | \Phi^{NZ;J_2}(q') \rangle \quad (\text{B.10})$$

<sup>1</sup>Excluimos aquí operadores que cambian el número de partículas como los asociados a las desintegraciones  $\alpha$  o  $\beta$ .

## B.2. Parte de la proyección a buen momento angular

Vemos que los elementos de matriz definidos en (ec. B.4) y (ec. B.7) son casos particulares de la expresión anterior (ec. B.10). Para evaluar estos solapes (ec. B.10) consideramos los proyectores a buen momento angular y buen número de partículas definidos en los capítulos 2 y 3:

$$P^{JM} = \sum_K a_K^J P_{MK}^J; \quad P_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega \quad (\text{B.11})$$

$$P^N = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi \rightarrow \quad P^N = \frac{1}{L} \sum_{l_N=1}^L e^{i\varphi_{l_N}(\hat{N}-N)} \quad (\text{B.12})$$

$$P^Z = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\varphi(\hat{Z}-Z)} d\varphi \rightarrow \quad P^Z = \frac{1}{L} \sum_{l_Z=1}^L e^{i\varphi_{l_Z}(\hat{Z}-Z)} \quad (\text{B.13})$$

Estos operadores cumplen las propiedades siguientes:

$$(P_{MK}^J)^\dagger = P_{KM}^J \quad (\text{B.14})$$

$$(P^N)^\dagger = P^N \quad (\text{B.15})$$

$$(P^Z)^\dagger = P^Z \quad (\text{B.16})$$

$$P_{MK}^J P_{M'K'}^{J'} = \delta_{JJ'} \delta_{KM'} P_{MK'}^J \quad (\text{B.17})$$

$$(P^N)^2 = P^N \quad (\text{B.18})$$

$$(P^Z)^2 = P^Z \quad (\text{B.19})$$

Con todo ello expresamos el solape (ec. B.10) como:

$$\mathcal{O}^{NZ;J_1J_2}(q, q') = \sum_{K_1K_2} (a_{K_1}^{J_1}(q))^* a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \Phi(q) | (P_{M_1K_1}^{J_1})^\dagger \hat{O} P_{M_2K_2}^{J_2} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \quad (\text{B.20})$$

En este apéndice vamos a calcular sólo los elementos de matriz de operadores  $\hat{O}$  que conmutan con el operador de rotaciones  $\hat{R}(\Omega)$  (y con los operadores del número de partículas). En el apéndice C se calcularán estos elementos en el caso de operadores multipolares, que no conmutan con  $\hat{R}(\Omega)$ , asociados al cálculo de las probabilidades de transición electromagnéticas.

De esta manera, la expresión B.20 queda:

$$\sum_{K_1K_2} (a_{K_1}^{J_1}(q))^* a_{K_2}^{J_2}(q') \frac{2J+1}{8\pi^2} \int \mathcal{D}_{K_1K_2}^{J*}(\Omega) o^{NZ}(q, q', \Omega) d\Omega \quad (\text{B.21})$$

donde hemos definido los solapes proyectados a buen número de partículas:

$$o^{NZ}(q, q', \Omega) \equiv \langle \Phi(q) | \hat{O} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \quad (\text{B.22})$$

Ahora consideramos las siguientes identidades:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_y} e^{-i\gamma\hat{J}_z} \quad (\text{B.23})$$

$$\mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) = e^{i\alpha M} e^{i\gamma K} d_{MK}^{J*}(\beta) \quad (\text{B.24})$$

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \quad (\text{B.25})$$

$$e^{-i\beta\hat{J}_y} = e^{i\frac{\pi}{2}\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_x} e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{J}_z} \quad (\text{B.26})$$

Además, imponemos **simetría axial** en las funciones de onda de tipo producto  $|\Phi\rangle$ :

$$\hat{J}_z |\Phi(q)\rangle = 0 \Rightarrow e^{i\xi\hat{J}_z} |\Phi(q)\rangle = |\Phi(q)\rangle \quad (\text{B.27})$$

Finalmente, la expresión (ec. B.21) se simplifica quedando:

$$\mathcal{O}^{NZ;J}(q, q') = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi d_{00}^{J*}(\beta) o^{NZ}(q, q', \beta) \sin\beta d\beta \quad (\text{B.28})$$

donde el solape (ec. B.22) es:

$$o^{NZ}(q, q', \beta) = \langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta\hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \quad (\text{B.29})$$

El intervalo de integración se puede reducir a la mitad si, además de la simetría axial, se impone que las funciones de onda de tipo producto tengan paridad y simplex positivos:

$$\hat{\Pi} |\Phi(q)\rangle = |\Phi(q)\rangle \quad (\text{B.30})$$

$$\hat{\Pi}_1 |\Phi(q)\rangle = |\Phi(q)\rangle \quad (\text{B.31})$$

donde  $\hat{\Pi}_1 = \hat{\Pi} e^{-i\pi\hat{J}_x}$  es el operador de simplex.

Con estos supuestos se tiene que la ecuación (ec. B.28):

$$\mathcal{O}^{NZ;J}(q, q') =$$

$$\frac{2J+1}{2} \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta\hat{J}_x} P^N P^Z \left( 1 + (-1)^J \hat{\Pi} \right) | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta =$$

$$(2J+1) \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J*}(\beta) o^{NZ}(q, q', \beta) \sin \beta d\beta \quad (\text{B.32})$$

donde se ha usado que las matrices reducidas de Wigner cumplen [2]:

$$d_{MM'}^J(\pi - \beta) = (-1)^{J+M} d_{M-M'}^J(\beta) \quad (\text{B.33})$$

Además, el momento angular  $J$  sólo puede tomar valores **pares**.

### B.3. Parte de la proyección al número de partículas

Por tanto, teniendo en cuenta la simetría axial tenemos que evaluar el siguiente solape:

$$o^{NZ}(q, q', \beta) = \langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \quad (\text{B.34})$$

Para ello usamos las expresiones (ec. B.12-B.13) de los proyectores:

$$o^{NZ}(q, q', \beta) = \frac{1}{L^2} \sum_{l_Z} \sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \frac{\langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle} \cdot \langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle \quad (\text{B.35})$$

Ahora tenemos en cuenta que las funciones de onda del tipo HFB no mezclan protones y neutrones:

$$|\Phi\rangle = |\Phi_Z\rangle |\Phi_N\rangle \quad (\text{B.36})$$

Con estas consideraciones, en primer lugar calcularemos la norma (sec. B.3.1) y posteriormente haremos uso del teorema de Wick extendido (véase apéndice A) para calcular los elementos de matriz del operador  $\hat{O}$  cuando éste sea un operador a un cuerpo (sec. B.3.2) o el hamiltoniano (sec. B.3.3).

### B.3.1. Norma

Con la factorización impuesta a la función de onda de tipo producto (ec. B.36) tenemos:

$$\begin{aligned} n^{NZ}(q, q', \beta) &\equiv \frac{1}{L^2} \sum_{l_Z} \sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle \\ &= n^N(q, q', \beta) n^Z(q, q', \beta) \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

donde

$$n^{N_\tau}(q, q', \beta) \equiv \frac{1}{L} \sum_{l_{N_\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l_{N_\tau}} N_\tau} \langle \Phi_{N_\tau}(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(q') \rangle \quad (\text{B.38})$$

Además, el elemento de matriz dentro del sumatorio se calcula con la fórmula de Onishi (ec. A.31 del apéndice A): Por tanto:

$$\langle \Phi_{N_\tau}(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_\tau}} | \Phi_{N_\tau}(q') \rangle = \left( e^{i[\beta \text{Tr}(J_x) - \varphi \text{Tr}(1)]} \text{Det} [T_{22}(q, q', \beta, \varphi_{l_\tau})] \right)^{1/2} \quad (\text{B.39})$$

### B.3.2. Operador a un cuerpo

Ahora consideramos un operador a un cuerpo:

$$\hat{O} = \sum_{ll'} O_{ll'} c_l^\dagger c_{l'} \quad ; \quad O_{ll'} = \langle l | \hat{O} | l' \rangle \quad (\text{B.40})$$

donde se impone que los operadores de partícula independiente no cambian el isospín ( $\tau_l = \tau_{l'}$ ). Estos operadores actuarán sobre una de las partes de isospín de la función de onda total. De esta manera tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle} &= \\ \sum_{ll'} O_{ll'} \frac{\langle \Phi_{N_\tau}(q) | c_l^\dagger c_{l'} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(q') \rangle}{\langle \Phi_{N_\tau}(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_{N_\tau}} \hat{N}_\tau} | \Phi_{N_\tau}(q') \rangle} &= \sum_{ll'} O_{ll'} \rho_{ll'}^{10, \tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N_\tau}}) \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$



donde hemos usado el teorema de Wick generalizado y la definición de la contracción correspondiente (ec. A.32). Por tanto:

$$\frac{\langle \Phi(q) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle} = \text{Tr} [O\rho^{10,\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N\tau}})] \quad (\text{B.42})$$

con lo que, usando las expresiones (ecs. B.35, B.37 y B.42), obtenemos finalmente:

$$\frac{o^{NZ}(q, q', \beta)}{n^{NZ}(q, q', \beta)} = \sum_{l_{N\tau}=1}^L y_{l_{N\tau}}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N\tau}}) \text{Tr} [O\rho^{10,\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N\tau}})] \quad (\text{B.43})$$

donde hemos definido:

$$y_{l_{N\tau}}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N\tau}}) \equiv \frac{e^{-i\varphi_{l_{N\tau}} N_{\tau}} \langle \Phi_{N_{\tau}}(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_{N\tau}} \hat{N}_{\tau}} | \Phi_{N_{\tau}}(q') \rangle}{\sum_{l_{N\tau}} e^{-i\varphi_{l_{N\tau}} N_{\tau}} \langle \Phi_{N_{\tau}}(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_{N\tau}} \hat{N}_{\tau}} | \Phi_{N_{\tau}}(q') \rangle} \quad (\text{B.44})$$

### B.3.3. Hamiltoniano

A continuación calcularemos los solapes para los términos del hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^{\dagger} c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_l c_k \quad (\text{B.45})$$

La parte de la energía cinética se obtiene directamente de la sección anterior (ec. B.42):

$$\sum_{ij} t_{ij} \frac{\langle \Phi(q) | c_i^{\dagger} c_j e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(q') \rangle} = \text{Tr} [t\rho^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] + \text{Tr} [N\rho^{10,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] \quad (\text{B.46})$$

Para la parte de energía potencial tenemos que indicar el isospín correspondiente a los índices  $(ijkl)$ . Además, tenemos que tener en cuenta que la tercera componente de isospín total inicial y final tienen que ser iguales y que la factorización de la función de onda (ec. B.36) impone que los índices de la matriz densidad y los tensores de apareamiento generalizados tengan el mismo isospín. Con estas consideraciones, la energía potencial queda:

$$\frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Phi_Z(q) | c_{i,Z}^{\dagger} c_{j,Z}^{\dagger} c_{l,Z} c_{k,Z} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle}{\langle \Phi_Z(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle} +$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Phi_N(q) | c_{i,N}^\dagger c_{j,N}^\dagger c_{l,N} c_{k,N} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle}{\langle \Phi_N(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Phi_Z(q) | c_{i,Z}^\dagger c_{k,Z} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle}{\langle \Phi_Z(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle} . \\
 & \frac{\langle \Phi_N(q) | c_{j,N}^\dagger c_{l,N} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle}{\langle \Phi_N(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Phi_Z(q) | c_{j,Z}^\dagger c_{l,Z} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle}{\langle \Phi_Z(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(q') \rangle} . \\
 & \frac{\langle \Phi_N(q) | c_{i,N}^\dagger c_{k,N} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle}{\langle \Phi_N(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(q') \rangle} \quad (B.47)
 \end{aligned}$$

A continuación hacemos uso del teorema de Wick generalizado y de las definiciones de las contracciones (ecs. A.21-A.23) por lo que:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Phi(q) | c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(q') \rangle}{\langle \Phi(q) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(q') \rangle} = \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,ZZ}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] + \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,NN}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] + \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,ZN}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] + \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,NZ}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] - \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] - \\
 & \frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta^{10,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] \quad (B.48)
 \end{aligned}$$

### B.3. Parte de la proyección al número de partículas

---

donde se han definido los campos de Hartree-Fock  $\Gamma_{nn'}^{10,\tau\tau'}$  y de apareamiento  $\Delta_{nn'}^{10,\tau}$  como:

$$\Gamma_{nn'}^{10,\tau\tau'}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau'}}) = \sum_{mm'} \bar{v}_{nmn'm'} \rho_{m'm}^{10,\tau'}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau'}}) \quad (\text{B.49})$$

$$\Delta_{nn'}^{10,\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau}}) = \sum_{mm'} \bar{v}_{nn'mm'} \kappa_{mm'}^{10,\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau}}) \quad (\text{B.50})$$

Por tanto, utilizando las expresiones anteriores y las ecuaciones (ecs. B.35, B.37, B.44) obtenemos finalmente:

$$e^{NZ}(q, q', \beta) \equiv \frac{h^{NZ}(q, q', \beta)}{n^{NZ}(q, q', \beta)} = e_{\text{Cin}}^{NZ}(q, q', \beta) + e_{\text{HF}}^{NZ}(q, q', \beta) + e_{\text{Pair}}^{NZ}(q, q', \beta) \quad (\text{B.51})$$

donde:

$$e_{\text{Cin}}^{NZ}(q, q', \beta) = \text{Tr} [t \rho^{P,10,Z}(q, q', \beta)] + \text{Tr} [N \rho^{P,10,N}(q, q', \beta)] \quad (\text{B.52})$$

$$e_{\text{HF}}^{NZ}(q, q', \beta) =$$

$$\begin{aligned} & \sum_{l_Z=1}^L y_{l_Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,ZZ}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] + \\ & \sum_{l_N=1}^L y_{l_N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,NN}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] + \\ & \sum_{l_Z=1}^L y_{l_Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,NZ}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{P,10,N}(q, q', \beta)] + \\ & \sum_{l_N=1}^L y_{l_N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Gamma^{10,ZN}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{P,10,Z}(q, q', \beta)] \quad (\text{B.53}) \end{aligned}$$

$$e_{\text{Pair}}^{NZ}(q, q', \beta) =$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{l_Z=1}^L y_{l_Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta^{10,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(q, q', \beta, \varphi_{l_Z})] - \\
& \sum_{l_N=1}^L y_{l_N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \frac{1}{2} \text{Tr} [\Delta^{10,NN}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N})] \quad (\text{B.54})
\end{aligned}$$

donde se ha definido la matriz densidad proyectada:

$$\rho^{P,10,N_\tau}(q, q', \beta) = \sum_{l_N=1}^L y_{l_N}(q, q', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{10,N_\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{N_\tau}}) \quad (\text{B.55})$$

Si en las expresiones anteriores imponemos ( $q = q'; \beta = 0$ ) no habrá generador de coordenadas ni proyección a buen momento angular y obtenemos las expresiones correspondientes a la proyección a buen número de partículas. En particular, la ecuación B.51 será la energía proyectada a buen número de partículas.

Por último, si sustituimos las definiciones anteriores en la expresión (ec. B.32) se obtiene:

$$E^{NZ;J}(q, q') \equiv \frac{\mathcal{H}^{NZ;J}(q, q')}{\mathcal{N}^{NZ;J}(q, q')} = \frac{\int_0^{\pi/2} d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) e^{NZ}(q, q', \beta) n^{NZ}(q, q', \beta)}{\int_0^{\pi/2} d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) n^{NZ}(q, q', \beta)} \quad (\text{B.56})$$

con la que para  $q = q'$  se obtiene el valor de la energía proyectada simultáneamente a buen número de partículas y momento angular.

## Referencias

- [1] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [2] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum*, World Scientific, Singapore, 1988

# Apéndice C

## Probabilidades de transición

En este apéndice se calcularán las probabilidades de transición electromagnéticas en el marco del método de la coordenada generadora con funciones de onda proyectadas a buen número de partículas y momento angular. La definición de dichas probabilidades es [1]:

$$B(E\lambda, J_2 \rightarrow J_1) = \frac{1}{2J_2 + 1} |\langle J_1 || \hat{M}_\lambda^{\text{ele}} || J_2 \rangle|^2 \quad (\text{C.1})$$

$$B(M\lambda, J_2 \rightarrow J_1) = \frac{1}{2J_2 + 1} |\langle J_1 || \hat{M}_\lambda^{\text{mag}} || J_2 \rangle|^2 \quad (\text{C.2})$$

Además, se define el momento cuadrupolar espectroscópico como:

$$Q_{\text{esp}}(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \begin{pmatrix} J & 2 & J \\ J & 0 & -J \end{pmatrix} \langle J || \hat{M}_2^{\text{ele}} || J \rangle \quad (\text{C.3})$$

y el momento dipolar magnético:

$$\mu(J) = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ J & 0 & -J \end{pmatrix} \langle J || \hat{M}_1^{\text{mag}} || J \rangle \quad (\text{C.4})$$

Los operadores asociados con tales transiciones son [1]:

$$\hat{M}_{\lambda\mu}^{\text{ele}} = r^\lambda Y_{\lambda\mu} \quad \text{electricas} \quad (\text{C.5})$$

$$\hat{M}_{\lambda\mu}^{\text{mag}} = \mu_N \left( g_s \vec{s} + \frac{2}{\lambda + 1} g_l \vec{l} \right) \vec{\nabla} (r^\lambda Y_{\lambda\mu}) \quad \text{magneticas} \quad (\text{C.6})$$

donde  $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos,  $\mu_N$  el magnetón nuclear y  $g_l, g_s$  los factores giromagnéticos de orbital y de espín.

Estos operadores cumplen las siguientes propiedades de simetría:

- Son operadores tensoriales de rango  $\lambda$  bajo rotaciones:

$$\hat{R}(\Omega)\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{R}^\dagger(\Omega) = \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu'\mu}^\lambda(\Omega) \hat{M}_{\lambda\mu'} \quad (\text{C.7})$$

- Se transforman bajo paridad de la siguiente manera:

$$\hat{\Pi}\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}^\dagger = (-1)^\lambda \hat{M}_{\lambda\mu} \quad \text{electricas} \quad (\text{C.8})$$

$$\hat{\Pi}\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}^\dagger = (-1)^{\lambda+1} \hat{M}_{\lambda\mu} \quad \text{magneticas} \quad (\text{C.9})$$

- Se transforman bajo simplex ( $\hat{\Pi}_1 = \hat{\Pi}e^{-i\pi\hat{J}_x}$ ) de la siguiente manera:

$$\hat{\Pi}_1\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}_1^\dagger = \hat{M}_{\lambda-\mu} \quad \text{electricas} \quad (\text{C.10})$$

$$\hat{\Pi}_1\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}_1^\dagger = -\hat{M}_{\lambda-\mu} \quad \text{magneticas} \quad (\text{C.11})$$

Por otro lado, debido a que es habitual que las funciones de onda de tipo producto tengan simplex positivo (ec. B.31), se definen los operadores  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  como:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{\mu,0})}} \left( \hat{M}_{\lambda\mu} + r_\mu(-1)^\mu \hat{M}_{\lambda-\mu} \right) \quad ; \quad r_\mu = \begin{cases} +1 & \text{si } \mu \geq 0 \\ -1 & \text{si } \mu < 0 \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

Estos nuevos operadores se transforman de la siguiente manera bajo la operación de simplex:

$$\hat{\Pi}_1\hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{ele}}\hat{\Pi}_1^\dagger = r_\mu(-1)^\mu \hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{ele}} \equiv c_\mu \hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{ele}} \quad (\text{C.13})$$

$$\hat{\Pi}_1\hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{mag}}\hat{\Pi}_1^\dagger = -r_\mu(-1)^\mu \hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{mag}} \equiv -c_\mu \hat{Q}_{\lambda\mu}^{\text{mag}} \quad (\text{C.14})$$

De las relaciones anteriores podemos reescribir  $\hat{M}_{\lambda\mu}$  en función de los operadores  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ :

$$\hat{M}_{\lambda 0} = \hat{Q}_{\lambda 0} \quad (\text{C.15})$$

$$\hat{M}_{\lambda\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{Q}_{\lambda\mu} - (-1)^\mu \hat{Q}_{\lambda-\mu} \right) \quad \mu > 0 \quad (\text{C.16})$$

$$\hat{M}_{\lambda-\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{Q}_{\lambda-\mu} + (-1)^\mu \hat{Q}_{\lambda\mu} \right) \quad \mu > 0 \quad (\text{C.17})$$

## C.1. Parte GCM

En primer lugar, partimos de la expresión del valor esperado para un operador cualquiera entre funciones de onda GCM (ecs. B.8-B.9):

$$\langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} | \hat{M}_{\lambda\mu} | \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \sum_{k_1 k_2} \left[ g_{k_1}^{NZ;J_1;\sigma_1} \right]^* \langle k_1^{NZ;J_1} | \hat{M}_{\lambda\mu} | k_2^{NZ;J_2} \rangle g_{k_2}^{NZ;J_2;\sigma_2} \quad (C.18)$$

donde el elemento de matriz entre los estados de la base natural es:

$$\langle k_1^{NZ;J_1;\sigma_1} | \hat{M}_{\lambda\mu} | k_2^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \int \left[ u_{k_1}^{NZ;J_1}(q) \right]^* \mathcal{M}_{\lambda\mu}^{NZ;J_1 J_2}(q, q') u_{k_2}^{NZ;J_2}(q') \frac{dq dq'}{\sqrt{n_{k_1}^{NZ;J_1} n_{k_2}^{NZ;J_2}}} \quad (C.19)$$

Por otro lado, ya que los operadores son tensores bajo rotaciones, se cumple el teorema de Wigner-Eckart:

$$\langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} | \hat{M}_{\lambda\mu} | \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \frac{\langle J_2 M_2 \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle}{\sqrt{2J_1 + 1}} \langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} || \hat{M}_\lambda || \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle \quad (C.20)$$

que define el elemento de matriz reducido  $\langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} || \hat{M}_\lambda || \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle$

## C.2. Parte de la proyección a buen momento angular

A continuación calculamos la parte del integrando:

$$\mathcal{M}_{\lambda\mu}^{NZ;J_1 J_2}(q, q') = \sum_{K_1 K_2} a_{K_1}^{J_1*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \Phi(q) | P_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{M}_{\lambda\mu} P_{K_2 M_2}^{J_2} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \quad (C.21)$$

Para ello evaluamos:

$$P_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{M}_{\lambda\mu} = \frac{2J_1 + 1}{8\pi^2} \int \mathcal{D}^{J_1*}_{K_1 M_1}(\Omega) \hat{R}(\Omega) \hat{M}_{\lambda\mu} \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{R}(\Omega) = \sum_{JMK} \sum_{\mu'} \langle JM \lambda \mu' | J_1 K_1 \rangle \langle JK \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle \hat{M}_{\lambda\mu'} P_{MK}^J \quad (C.22)$$

con lo que obtenemos:

$$P_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{M}_{\lambda \mu} P_{M_2 K_2}^{J_2} = \langle J_2 M_2 \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle \sum_{\mu' M} \langle J_2 M \lambda \mu' | J_1 K_1 \rangle \hat{M}_{\lambda \mu'} P_{M K_2}^{J_2} \quad (\text{C.23})$$

Para hallar las expresiones anteriores (ecs. C.22-C.23) hemos utilizado el carácter tensorial de los operadores  $\hat{M}_{\lambda \mu}$  y las propiedades de las matrices de Wigner  $\mathcal{D}_{KM}^J(\Omega)$  y de los coeficientes de Clebsch-Gordan, en particular [2]:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{M_1 K_1}^{J_1}(\Omega) \mathcal{D}_{M_2 K_2}^{J_2}(\Omega) = \\ \sum_{J=|J_1-J_2|}^{J_1+J_2} \sum_{MK} \langle J_1 M_1 J_2 M_2 | JM \rangle \langle J_1 K_1 J_2 K_2 | JK \rangle \mathcal{D}_{MK}^J(\Omega) \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

$$\mathcal{D}_{MK}^J(\Omega) = (-1)^{K-M} \mathcal{D}_{-M-K}^{J*}(\Omega) \quad (\text{C.25})$$

$$\begin{aligned} C_{a\alpha b\beta}^{c\gamma} \equiv \langle a\alpha b\beta | c\gamma \rangle &= (-1)^{a+b-c} C_{b\beta a\alpha}^{c\gamma} = \\ &= (-1)^{a-\alpha} \sqrt{\frac{2c+1}{2b+1}} C_{c\gamma a-\alpha}^{b\beta} \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

A continuación sustituimos la ecuación (ec. C.23) en (ec. C.21) y teniendo en cuenta la definición del elemento de matriz reducido (ec. C.20) obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\lambda}^{NZ; J_1 J_2}(q, q') &= \mathcal{M}_{\lambda \mu}^{NZ; J_1 J_2}(q, q') \frac{\sqrt{2J_1+1}}{\langle J_2 M_2 \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle} = \\ \frac{(2J_1+1)(2J_2+1)}{8\pi^2} (-1)^{J_2-\lambda} &\cdot \sum_{K_1 K_2} a_{K_1}^{J_1*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') (-1)^{K_1} \\ \sum_{\mu' M} \begin{pmatrix} J_2 & \lambda & J_1 \\ M & \mu' & -K_1 \end{pmatrix} &\cdot \int \mathcal{D}_{M K_2}^{J_2*}(\Omega) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda \mu'} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

donde hemos usado la relación entre los coeficientes de Clebsch-Gordan y los coeficientes 3-J:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle = (-1)^{j_1-j_2+m_3} \sqrt{2j_3+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{C.28})$$



## C.2. Parte de la proyección a buen momento angular

A continuación imponemos que las funciones de onda de tipo producto tengan simetría axial y paridad y simplex positivos (ecs. B.27, B.30, B.31). Con ello, la integral en los ángulos de Euler de la ecuación (ec. C.27) se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}_{MK_2}^{J_2^*}(\Omega) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(q') \rangle &= 4\pi^2 \delta_{M,-\mu'} \delta_{K_2,0} i^{\mu'} \quad . \\ \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2^*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z \left( 1 + (-1)^{J_2} \hat{\Pi} \right) | \Phi(q') \rangle \text{sen} \beta d\beta &= \\ 8\pi^2 \delta_{M,-\mu'} \delta_{K_2,0} i^{\mu'} \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2^*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \text{sen} \beta d\beta & \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

donde, al igual que ocurría en el apéndice B, se puede reducir el intervalo de integración haciendo uso de las simetrías mencionadas y de las propiedades de las matrices reducidas de Wigner (ec. B.33). Además,  $J_2$  tiene que ser un número **par**.

A continuación sustituimos la expresión (ec. C.29) en la ecuación (ec. C.27), donde, debido a la simetría axial,  $K_1 = 0$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\lambda}^{NZ;J_1J_2}(q, q') &= (2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(-1)^{\lambda} \sum_{\mu'} \begin{pmatrix} J_2 & \lambda & J_1 \\ -\mu' & \mu' & 0 \end{pmatrix} \\ i^{\mu'} \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2^*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \text{sen} \beta d\beta & \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

Ahora hacemos explícitamente la suma en el índice  $\mu'$  quedando como resultado final:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\lambda}^{NZ;J_1J_2}(q, q') &= (2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(-1)^{\lambda} \cdot [ \\ \begin{pmatrix} J_2 & \lambda & J_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J_2^*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda 0} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \text{sen} \beta d\beta + \\ \sum_{\mu' > 0} i^{\mu'} (1 \pm (-1)^{J_1+\lambda}) \begin{pmatrix} J_2 & \lambda & J_1 \\ -\mu' & \mu' & 0 \end{pmatrix} \cdot \\ \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2^*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \text{sen} \beta d\beta & \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

donde se han usado las transformaciones de los operadores bajo simplex (ecs. C.10-C.11), y las siguientes propiedades de los símbolos 3-J y de las matrices reducidas de Wigner:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{C.32})$$

$$d_{MM'}^J(\beta) = (-1)^{M-M'} d_{-M-M'}^J(\beta) \quad (\text{C.33})$$

En la expresión final (ec. C.31) se tiene el signo (+) para los operadores eléctricos y el signo (-) para los magnéticos.

A continuación, vamos a calcular los elementos de matriz que aparecen en la (ec. C.31) con  $\mu' \geq 0$  usando de nuevo la simetría simplex y los operadores  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  (ec. C.12):

$$\begin{aligned} & \langle \Phi(q) | \hat{M}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle = \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \Phi(q) | \hat{Q}_{\lambda\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle - (-1)^\mu \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{\lambda-\mu'} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle) \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

Cada uno de estos elementos de matriz se calculan con las expresiones halladas en el apéndice B (ecs. B.34, B.35, B.42). Además, debido a su comportamiento bajo la transformación de simplex, estos elementos serán distintos de cero cuando se cumpla:

$$c_\mu = +1 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mu \geq 0; \mu \text{ par} \\ \mu < 0; \mu \text{ impar} \end{array} \right\} \text{ electricas} \quad (\text{C.35})$$

$$c_\mu = -1 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mu \geq 0; \mu \text{ impar} \\ \mu < 0; \mu \text{ par} \end{array} \right\} \text{ magneticas} \quad (\text{C.36})$$

### C.3. Transiciones cuadrupolares eléctricas. Momento cuadrupolar espectroscópico

Ahora aplicamos las expresiones anteriores para calcular la probabilidad de transición cuadrupolar eléctrica reducida y el momento cuadrupolar es-

### C.3. Transiciones cuadrupolares eléctricas. Momento cuadrupolar espectroscópico

pectroscópico. A partir de las definiciones (ecs. C.1, C.3) tenemos:

$$B(E2, J_2\sigma_2 \rightarrow J_1\sigma_1) = \frac{1}{2J_2+1} |\langle J_1\sigma_1 || \hat{M}_2^{\text{ele}} || J_2\sigma_2 \rangle|^2 \quad (\text{C.37})$$

$$Q_{\text{esp}}^\sigma(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \begin{pmatrix} J & 2 & J \\ J & 0 & -J \end{pmatrix} \langle J\sigma || \hat{M}_2^{\text{ele}} || J\sigma \rangle \quad (\text{C.38})$$

donde el elemento de matriz reducido se calcula con los estados del generador:

$$\langle \Psi^{NZ;J_1;\sigma_1} || \hat{M}_2 || \Psi^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \sum_{k_1 k_2} \left[ g_{k_1}^{NZ;J_1;\sigma_1} \right]^* \langle k_1^{NZ;J_1} || \hat{M}_2^{\text{ele}} || k_2^{NZ;J_2} \rangle g_{k_2}^{NZ;J_2;\sigma_2} \quad (\text{C.39})$$

con:

$$\langle k_1^{NZ;J_1;\sigma_1} || \hat{M}_2^{\text{ele}} || k_2^{NZ;J_2;\sigma_2} \rangle = \int \left[ u_{k_1}^{NZ;J_1}(q) \right]^* \mathcal{M}_2^{NZ;J_1 J_2;\text{ele}}(q, q') u_{k_2}^{NZ;J_2}(q') \frac{dq dq'}{\sqrt{n_{k_1}^{NZ;J_1} n_{k_2}^{NZ;J_2}}} \quad (\text{C.40})$$

El elemento de matriz reducido entre estados proyectados será (ec C.31):

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_2^{NZ;J_1 J_2;\text{ele}}(q, q') &= (2J_1+1)(2J_2+1) \cdot \left[ \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{20}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta + \\ &\quad \sum_{\mu' > 0} 2i^{\mu'} \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -\mu' & \mu' & 0 \end{pmatrix} \cdot \\ &\quad \left. \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{M}_{2\mu'}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta \right] \end{aligned} \quad (\text{C.41})$$

donde  $J_1$  tiene que ser **par** ya que de otro modo se anula. Por último, usando las relaciones (ecs. C.15, C.16 y C.36) obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_2^{NZ;J_1 J_2;\text{ele}}(q, q') &= (2J_1+1)(2J_2+1) \cdot \left[ \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{20}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta + \right. \\ &\quad \left. \sum_{\mu' > 0} 2i^{\mu'} \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -\mu' & \mu' & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{-\mu'0}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{2\mu'}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sqrt{2}i \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{-10}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{2-1}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta - \\ & \sqrt{2} \begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -2 & 2 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{-20}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{22}^{\text{ele}} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

## C.4. Transiciones dipolares magnéticas. Momento dipolar magnético

Al igual que hicimos en la sección anterior, ahora calculamos (ec. C.4):

$$B(M1, J_2\sigma_2 \rightarrow J_1\sigma_1) = \frac{1}{2J_2 + 1} |\langle J_1\sigma_1 | \hat{M}_1^{\text{mag}} | J_2\sigma_2 \rangle|^2 \quad (\text{C.43})$$

$$\mu(J\sigma) = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ J & 0 & -J \end{pmatrix} \langle J\sigma | \hat{M}_1^{\text{mag}} | J\sigma \rangle \quad (\text{C.44})$$

La parte del generador de coordenadas es la misma que en el caso cuadrupolar eléctrico sólo que ahora el elemento de matriz reducido entre estados proyectados será:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_1^{NZ; J_1 J_2; \text{mag}}(q, q') &= -\sqrt{2}i(2J_1 + 1)(2J_2 + 1) \cdot [ \\ & \begin{pmatrix} J_2 & 1 & J_1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{\pi/2} d_{-10}^{J_2*}(\beta) \langle \Phi(q) | \hat{Q}_{11} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(q') \rangle \sin\beta d\beta ] \end{aligned} \quad (\text{C.45})$$

donde hemos usado las propiedades de los operadores bajo simplex y además  $J_1$  tiene que ser de nuevo **par**.

## Referencias

- [1] P. Ring, and P. Schuck, *The nuclear many body problem*, Springer-Verlag, Berlin, 1980
- [2] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum*, World Scientific, Singapore, 1988

# Apéndice D

## Simetrías autoconsistentes

Como se ha visto a lo largo de esta memoria, la ruptura de las simetrías en las funciones de onda de tipo producto (y su restauración) permite la obtención de soluciones aproximadas que describan adecuadamente el sistema de muchos cuerpos nuclear. Sin embargo, si se permite la transformación de HFB más general posible, el cálculo sería muy costoso desde un punto de vista computacional. Por ello, es habitual imponer simetrías autoconsistentes que, como veremos a continuación, permiten dividir las matrices de la transformación HFB en bloques más pequeños haciendo el problema más asequible.

En este trabajo se han impuesto las siguientes simetrías autoconsistentes a las funciones de onda de tipo producto  $|\Phi\rangle$ :

- Tercera componente de isospín  $|\Phi\rangle = |\Phi_Z\rangle|\Phi_N\rangle$
- Inversión temporal  $\hat{T}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$
- Paridad  $\hat{\Pi}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$
- Simplex  $\hat{\Pi}_1|\Phi\rangle = \hat{\Pi}e^{-i\pi\hat{J}_x}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$
- Axial  $\hat{J}_z|\Phi\rangle = 0$  salvo que se indique lo contrario

La introducción de estas simetrías suponen una limitación del modelo, que será más o menos importante dependiendo del sistema concreto que se estudie. Así, los sistemas donde la deformación octupolar (ruptura de paridad), la triaxialidad o el apareamiento protón-neutrón (ruptura de la tercera componente de isospín) sean relevantes no se podrán estudiar adecuadamente con este espacio de funciones.

A continuación vamos a estudiar la estructura de bloques de las matrices que aparecen en los cálculos de campo medio y BMFA. En primer lugar definiremos la base de partícula independiente en la que se desarrollan las cuasipartículas y describiremos sus propiedades. Posteriormente impondremos las simetrías autoconsistentes para hallar la estructura de bloques antes mencionada.

## D.1. Base triaxial

Definimos los estados de la base triaxial como:

$$c_k^\dagger |-\rangle \equiv |k\rangle \rightarrow |k\rangle = |n_x n_y n_z\rangle |S_k\rangle \quad k > 0 \quad (\text{D.1})$$

$$c_{\bar{k}}^\dagger |-\rangle \equiv |\bar{k}\rangle \rightarrow |\bar{k}\rangle = |n_x n_y n_z\rangle |S_{\bar{k}}\rangle \quad k > 0 \quad (\text{D.2})$$

Estos operadores cumplen las relaciones de anticonmutación de los fermiones:

$$\{c_k^\dagger, c_{k'}\} = \delta_{kk'}; \quad \{c_k^\dagger, c_{\bar{k}}^\dagger\} = 0; \quad \{c_k, c_{k'}\} = 0 \quad (\text{D.3})$$

Además, los estados  $|n_x n_y n_z\rangle$  son soluciones en la base cartesiana de un oscilador armónico tridimensional:

$$\langle \vec{r} | n_x n_y n_z \rangle = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) \quad (\text{D.4})$$

$$\psi_{n_i}(x_i) = (2^{n_i} n_i! b_i \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-\frac{x_i^2}{2b_i^2}} H_{n_i} \left( \frac{x_i}{b_i} \right) \quad (\text{D.5})$$

La parte de espín se expresa como:

$$\begin{aligned} |S_k\rangle &= \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - (-1)^{n_x} |\downarrow\rangle) \\ |S_{\bar{k}}\rangle &= \frac{i^{n_y}}{\sqrt{2}} (-1)^{n_x+n_y+1} (|\uparrow\rangle + (-1)^{n_x} |\downarrow\rangle) \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Con estas definiciones y por sustitución directa se pueden demostrar las siguientes propiedades:

- Tercera componente de isospín

$$e^{-i\hat{T}_3} c_k^\dagger e^{i\hat{T}_3} = e^{it_{3,k}} c_k^\dagger \quad (\text{D.7})$$

- Inversión temporal  $\hat{\mathcal{T}} = \hat{K}_0 e^{i\pi \hat{S}_y}$  siendo  $\hat{K}_0$  el operador de conjugación

compleja:

$$\hat{\mathcal{T}} c_k^\dagger \hat{\mathcal{T}}^\dagger = c_{\bar{k}}^\dagger \quad (\text{D.8})$$

- Paridad

$$\hat{\Pi} c_k^\dagger \hat{\Pi}^\dagger = \pi_k c_k^\dagger \quad (\text{D.9})$$

$$\hat{\Pi} c_{\bar{k}}^\dagger \hat{\Pi}^\dagger = \pi_k c_{\bar{k}}^\dagger \quad (\text{D.10})$$

- Simetría  $\hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{\mathcal{T}}$

$$\hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{\mathcal{T}} c_k^\dagger \left( \hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{\mathcal{T}} \right)^\dagger = c_k^\dagger \quad (\text{D.11})$$

$$\hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{\mathcal{T}} c_{\bar{k}}^\dagger \left( \hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{\mathcal{T}} \right)^\dagger = c_{\bar{k}}^\dagger \quad (\text{D.12})$$

- Simplex

$$\hat{\Pi}_1 c_k^\dagger \hat{\Pi}_1^\dagger = i c_k^\dagger \quad (\text{D.13})$$

$$\hat{\Pi}_1 c_{\bar{k}}^\dagger \hat{\Pi}_1^\dagger = -i c_{\bar{k}}^\dagger \quad (\text{D.14})$$

## D.2. Estructura de bloques de las matrices $U, V$

Ahora **se imponen** las simetrías anteriores a los operadores de cuasi-partícula definidos por la transformación de HFB (véase ec. 4.4):

$$\beta_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \quad (\text{D.15})$$

- Tercera componente de isospín

$$e^{-i\hat{T}_3} \beta_k^\dagger e^{i\hat{T}_3} = e^{it_{3,k}} \beta_k^\dagger \quad (\text{D.16})$$

Haciendo uso de ecuación anterior (ec. D.16) y las relaciones (ecs. D.7 y D.15) y obtenemos:

$$\sum_l e^{-it_{3,l}} \left( U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \right) = e^{-it_{3,k}} \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l \Rightarrow t_{3,l} = t_{3,k} \quad (\text{D.17})$$

Esto hace que las matrices  $(U, V)$  no mezclen índices con distinto isospín:

$$U = \begin{matrix} & \begin{matrix} (Z) & (N) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (Z) \\ (N) \end{matrix} & \begin{pmatrix} U^Z & 0 \\ 0 & U^N \end{pmatrix} \end{matrix} ; \quad V = \begin{matrix} & \begin{matrix} (Z) & (N) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (Z) \\ (N) \end{matrix} & \begin{pmatrix} V^Z & 0 \\ 0 & V^N \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (\text{D.18})$$

■ Inversión temporal

$$\hat{T} \beta_k^\dagger \hat{T}^\dagger = \beta_k^\dagger \quad (\text{D.19})$$

■ Paridad

$$\hat{\Pi} \beta_k^\dagger \hat{\Pi}^\dagger = \pi_k \beta_k^\dagger \quad (\text{D.20})$$

Al igual que hacíamos con el isospín se obtiene que debido a la condición (ec. D.20) no se mezclan índices con distinta paridad:

$$U = \begin{matrix} & \begin{matrix} (+) & (-) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (+) \\ (-) \end{matrix} & \begin{pmatrix} U^+ & 0 \\ 0 & U^- \end{pmatrix} \end{matrix} ; \quad V = \begin{matrix} & \begin{matrix} (+) & (-) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (+) \\ (-) \end{matrix} & \begin{pmatrix} V^+ & 0 \\ 0 & V^- \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (\text{D.21})$$

■ Simetría  $\hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{T}$

$$\hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{T} \beta_k^\dagger \left( \hat{\Pi} e^{-i\pi \hat{J}_y} \hat{T} \right)^\dagger = \beta_k^\dagger \quad (\text{D.22})$$

Como el operador de inversión temporal es antilineal, la ecuación anterior implica:

$$U_{lk}^* = U_{lk}; \quad V_{lk}^* = V_{lk}; \quad \rightarrow (U, V) \text{ reales} \quad (\text{D.23})$$

■ Simplex

$$\hat{\Pi}_1 \beta_k^\dagger \hat{\Pi}_1^\dagger = i \beta_k^\dagger \quad (\text{D.24})$$

$$\hat{\Pi}_1 \beta_k^\dagger \hat{\Pi}_1^\dagger = -i \beta_k^\dagger \quad (\text{D.25})$$

Ahora desarrollamos la transformación de HFB (ec. D.15) como:

$$\beta_k^\dagger = \sum_{l>0} U_{lk} c_l^\dagger + U_{\bar{l}k} c_l^\dagger + V_{lk} c_l + V_{\bar{l}k} c_l^\dagger \quad (k > 0) \quad (\text{D.26})$$

$$\beta_k^\dagger = \sum_{l>0} U_{l\bar{k}} c_l^\dagger + U_{\bar{l}\bar{k}} c_l^\dagger + V_{l\bar{k}} c_l + V_{\bar{l}\bar{k}} c_l^\dagger \quad (k > 0) \quad (\text{D.27})$$



Imponiendo las ecuaciones (ecs. D.24,D.25) y las transformaciones de simplex de los operadores de partícula independiente (ecs. D.13,D.14) obtenemos:

$$U_{l\bar{k}} = U_{\bar{l}k} = 0; \quad V_{lk} = V_{\bar{l}\bar{k}} = 0 \quad (\text{D.28})$$

con lo que se tiene la siguiente estructura de bloques debida a la conservación de la simetría simplex:

$$U = \begin{matrix} & \begin{matrix} (k) & (\bar{k}) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (l) \\ (\bar{l}) \end{matrix} & \begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} \end{matrix} ; \quad V = \begin{matrix} & \begin{matrix} (k) & (\bar{k}) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (l) \\ (\bar{l}) \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & V_2 \\ V_1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (\text{D.29})$$

Finalmente, se pueden ordenar los estados de la base de partícula independiente de tal manera que las matrices de la transformación de HFB se escriban como:

$$U = \begin{pmatrix} U^{Z,+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U^{Z,-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U^{N,+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U^{N,-} \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} V^{Z,+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V^{Z,-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V^{N,+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V^{N,-} \end{pmatrix} \quad (\text{D.30})$$

y cada uno de los bloques de isospín y paridad:

$$U^{\tau\pi} = \begin{pmatrix} U_1^{\tau\pi} & 0 \\ 0 & U_2^{\tau\pi} \end{pmatrix} ; \quad V^{\tau\pi} = \begin{pmatrix} 0 & V_2^{\tau\pi} \\ V_1^{\tau\pi} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.31})$$

### D.3. Estructura de bloques de la matriz densidad y tensores de apareamiento

En esta sección vamos a expresar la estructura de bloques de las matrices relevantes en los cálculos de campo medio y BMFA que aparecen en el apéndice A. En primer lugar, veremos la estructura del operador de transformación  $\hat{\mathcal{M}}$  en el caso de la proyección a buen número de partículas y

momento angular:

$$\hat{\mathcal{M}} = \hat{R}(\Omega)e^{i\varphi\hat{N}} = \sum_{ij} M_{ij}c_i^\dagger c_j = e^{i\varphi} \sum_{ij} R_{ij}(\Omega)c_i^\dagger c_j \quad (\text{D.32})$$

Este operador conmuta tanto con la tercera componente de isospín como con la paridad con lo que la matriz correspondiente  $M_{ij}$  será diagonal:

$$M = \begin{pmatrix} M^{Z,+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M^{Z,-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M^{N,+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M^{N,-} \end{pmatrix} \quad (\text{D.33})$$

El operador de rotaciones general no conmuta con la operación de simplex con lo que cada uno de esos bloques de paridad e isospín queda:

$$M^{\tau\pi} = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} R_1^\pi(\Omega) & R_4^\pi(\Omega) \\ R_3^\pi(\Omega) & R_2^\pi(\Omega) \end{pmatrix} \quad (\text{D.34})$$

La expresión anterior corresponde a la estructura de bloques en el caso de una proyección a buen momento angular **triaxial**. Si además imponemos la simetría axial en las funciones de onda de tipo producto, el operador de rotación se puede reducir a  $\hat{R}(\beta) = e^{-i\beta\hat{J}_x}$  que conmuta evidentemente con el operador de simplex  $\hat{\Pi}_1$ . Por tanto, cuando se tiene **simetría axial**, la ecuación (ec. D.34) se reduce a:

$$M^{\tau\pi} = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} R_1^\pi(\beta) & 0 \\ 0 & R_2^\pi(\beta) \end{pmatrix} \quad (\text{D.35})$$

A continuación, teniendo en cuenta la última ecuación, la estructura de las matrices  $U, V$  (ec. D.31) y las expresiones dadas en el apéndice A obtenemos:

- Matriz  $T_{22}$  (ec. A.30)

$$\begin{aligned} T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi) &= V_{\tau\pi}^T(q)e^{i\varphi}R^\pi(\beta)V_{\tau,\pi}^*(q') + U_{\tau,\pi}^T(q)e^{-i\varphi}(R^\pi(\beta))^*U^*(q') = \\ &= \begin{pmatrix} (T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi))_1 & 0 \\ 0 & (T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi))_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

Donde:

$$(T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi))_1 =$$

$$= (V_1^{\tau\pi}(q))^T e^{i\varphi} R_2^\pi(\beta) V_1^{\tau\pi}(q') + (U_1^{\tau\pi}(q))^T e^{-i\varphi} (R_1^\pi(\beta))^* (U_1^{\tau\pi}(q'))^* \quad (\text{D.37})$$

$$\begin{aligned} & (T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi))_2 = \\ &= (V_2^{\tau\pi}(q))^T e^{i\varphi} R_1^\pi(\beta) V_2^{\tau\pi}(q') + (U_2^{\tau\pi}(q))^T e^{-i\varphi} (R_2^\pi(\beta))^* (U_2^{\tau\pi}(q'))^* \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

■ Solape de la norma (ec. A.31)

$$\begin{aligned} n^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi) &= \left( e^{i[\beta\text{Tr}(J_x^\pi) - \varphi\text{Tr}(1^\pi)]} \text{Det} [T_{22}^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi)] \right)^{1/2} = \\ &= \left( e^{i[\beta\text{Tr}((J_x^\pi)_1) - \varphi\text{Tr}(1^\pi)]} \text{Det} [(T_{22}^{\tau\pi})_1] \right)^{1/2} \cdot \left( e^{i[\beta\text{Tr}((J_x^\pi)_2) - \varphi\text{Tr}(1^\pi)]} \text{Det} [(T_{22}^{\tau\pi})_2] \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{D.39})$$

Se puede demostrar que las dos raíces de la ecuación anterior son iguales con lo que el signo de la raíz cuadrada del solape de la norma queda determinado:

$$n^{\tau\pi}(q, q', \beta, \varphi) = e^{i[\beta\text{Tr}((J_x^\pi)_1) - \varphi\text{Tr}(1^\pi)]} \text{Det} [(T_{22}^{\tau\pi})_1] \quad (\text{D.40})$$

■ Matriz densidad (ec. A.32)

$$\begin{aligned} \rho^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi) &= e^{i\varphi} R^\pi(\beta) (V^{\tau\pi}(q'))^* (T_{22}^{\tau\pi})^{-1} (V^{\tau\pi}(q))^T = \\ &= \begin{pmatrix} (\rho^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_1 & 0 \\ 0 & (\rho^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D.41})$$

donde

$$\rho^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi)_1 =$$

$$e^{i\varphi} R_1^\pi(\beta) (V_2^{\tau\pi}(q'))^* ((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_2 (V_2^{\tau\pi}(q))^T$$

$$\rho^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi)_1 =$$

$$e^{i\varphi} R_2^\pi(\beta)(V_1^{\tau\pi}(q'))^*((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_1(V_1^{\tau\pi}(q))^T \quad (\text{D.42})$$

- Tensores de apareamiento (ecs. A.33,A.34)

$$\begin{aligned} \kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi) &= e^{i\varphi} R^\pi(\beta)(V^{\tau\pi}(q'))^*(T_{22}^{\tau\pi})^{-1}(U^{\tau\pi}(q))^T = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & (\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_2 \\ (\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D.43})$$

con

$$\begin{aligned} (\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_1 &= e^{i\varphi} R_2^\pi(\beta)(V_1^{\tau\pi}(q'))^*((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_1(U_1^{\tau\pi}(q))^T \\ (\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_2 &= e^{i\varphi} R_1^\pi(\beta)(V_2^{\tau\pi}(q'))^*((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_1(U_2^{\tau\pi}(q))^T \end{aligned} \quad (\text{D.44})$$

$$\begin{aligned} \kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi) &= -e^{-i\varphi} (R^\pi(\beta))^*(U^{\tau\pi}(q'))^*(T_{22}^{\tau\pi})^{-1}(V^{\tau\pi}(q))^T = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & (\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_2 \\ (\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D.45})$$

con

$$\begin{aligned} (\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_1 &= -e^{-i\varphi} (R_2^\pi(\beta))^*(U_2^{\tau\pi}(q'))^*((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_2(V_2^{\tau\pi}(q))^T \\ (\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_2 &= -e^{-i\varphi} (R_1^\pi(\beta))^*(U_1^{\tau\pi}(q'))^*((T_{22}^{\tau\pi})^{-1})_1(V_1^{\tau\pi}(q))^T \end{aligned} \quad (\text{D.46})$$

Además, por simetría de los tensores de apareamiento se debe cumplir que:

$$\begin{aligned} (\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_2 &= -[(\kappa^{\tau\pi,10}(q, q', \beta, \varphi))_1]^T \\ (\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_2 &= -[(\kappa^{\tau\pi,01}(q, q', \beta, \varphi))_1]^T \end{aligned} \quad (\text{D.47})$$

- Campos de Hartree-Fock (ec. B.49) y de apareamiento (ec. B.50)

Debido a la estructura de bloques de la matriz densidad y de los tensores de apareamiento, a que la interacción  $\hat{V}$  conmuta con el operador de simplex y a que la base de partículas independientes tiene el simplex bien definido se tiene que:

$$\Gamma^{10,\tau\tau'}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau'}}) = \begin{pmatrix} (\Gamma^{10,\tau\tau'})_1 & 0 \\ 0 & (\Gamma^{10,\tau\tau'})_2 \end{pmatrix} \quad (\text{D.48})$$

$$\Delta^{10,\tau}(q, q', \beta, \varphi_{l_{\tau}}) = \begin{pmatrix} 0 & (\Delta^{10,\tau})_2 \\ (\Delta^{10,\tau})_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.49})$$



# Agradecimientos

No creo que pueda ser capaz de incluir y transmitir en unas pocas líneas todo mi agradecimiento a las personas que, de una manera u otra, han hecho posible este trabajo, ya que es mucho lo que les debo. Al menos intentaré hacerlo lo mejor posible.

Para mi ha sido una suerte y un privilegio haber tenido como director de tesis a Luis Egido. Muchas gracias Luis por haberme enseñado tantas cosas sobre Física Nuclear, por haber dedicado tanto tiempo y esfuerzo en este trabajo, y por haber depositado tu confianza en mi. Gracias además por tus consejos. Ha sido, y es, un placer trabajar contigo.

También quiero dar las gracias muy especialmente a Luis Robledo, por su disposición a ayudarme siempre que lo he necesitado, por explicarme siempre de manera sencilla cualquier problema de Física o de programación, por haber podido disfrutar de una beca FPU, y, sobre todo, por su amistad y sus consejos.

Dentro del Departamento de Física Teórica de la UAM, he podido además disfrutar de los conocimientos de Física Nuclear de Alfredo Poves y de Andrea Jungclauss de los que he aprendido mucho, tanto en sus cursos y seminarios, como en las discusiones de problemas concretos. Asimismo, quiero extender mi gratitud a todo el Departamento, especialmente a los dos directores que ha tenido en los años de elaboración de esta tesis (Alfredo Poves y José Luis Sánchez Gómez) y al personal de administración (Juan Carlos, Lola, Yolanda, ...) y responsables de informática (José del Peso, Luis Fernando Muñoz, Juan José Pardo) por facilitarme todos los recursos humanos y técnicos para desarrollar mi trabajo.

A Miguel Ángel Fernández le tengo que agradecer el haberme introducido en la investigación en Física Nuclear tras un encuentro casual en un seminario. Gracias Mafer por haberme ayudado en mis inicios con el HFB y haberme

enseñado los misterios del linux y del latex, así como por todas las discusiones mantenidas sobre la proyección y el generador. Lo mismo podría decir de Javier Menéndez y Víctor Modamio, con los que juntos hemos discutido nuestros problemas tantas y tantas veces en la pizarra del despacho, y de Sara Pérez, a la que además agradezco el tiempo de cálculo 'robado' a su *galilei*.

Mis primeros pasos en la investigación los di con Ricardo García en el IMM-CSIC, donde tuve la suerte además de coincidir con Montse, Álvaro, Marta, Javier y Noe. A todos ellos les agradezco el haberme introducido en esta profesión y su amistad.

A lo largo de estos años, para mí ha sido un placer compartir mesa, mantel, café y sobremesa universitaria, (más alguna que otra salida nocturna) con Nuria, Juanjo, Rocío, Olga, José Delgado, Afri, Javi, Chiqui, Sergio Montero, Pablo, Enrique, Nico, Ernesto, Dani, Sergio Montañez, Alberto, Ana, Ana Teixeira, Luisfer, Óscar Paz, Edu y demás. Afortunadamente, mi relación con algunos compañeros ha ido más allá de la universidad y su amistad se puede considerar como una de las mejores conclusiones de esta tesis. Mil gracias a Mafer, Javi, Afri, Chiqui, Nuria, Juanjo, Víctor y Sergio por cuidar de mi.

Tampoco sería justo olvidarme de mis compañeros de licenciatura (Sergio Chico y Félix), de piso (Sergio y Mafer otra vez y Esther y Bea), así como de mis amigos, en los que siempre encuentro un refugio seguro (María Coronado, José, Víctor, Sotos, Mendieta, Arancha, Miguel, Nuria, Patricia, Perea y, muy especialmente, Alberto). A Patricia Ríos le debo el último empujón que me ayudó a ponerme a escribir la memoria, los ánimos necesarios para terminarla y que me enseñara que los planetas son algo más que cuerpos celestes. Y también las risas más recientes. Muchas gracias Patricia por todo ello y mucho más. A Laura le tengo que agradecer su apoyo constante durante los años de licenciatura y su amistad y cariño inquebrantables.

Y muchas gracias a mi familia, a mi tío Pedro, Isabel, Dani. A la Teta y a la tía Petra. Al abuelo Leandro que fue y siempre será un ejemplo para mí. A mis hermanos y mucho más que amigos José Ángel, Carmina y Ramón. A la pequeña María. Y sobre todo a mis padres Ángel y Mari Carmen porque lo más importante me lo habéis enseñado vosotros.

Madrid, 9 de septiembre de 2007



# Índice de figuras

2.1.	Tabla de núcleos dividida en distintas regiones dependiendo de los métodos que se emplean para describir sus propiedades. Véase el texto para más detalles. La figura está adaptada de la referencia [1]. . . . .	10
5.1.	Imagen esquemática de la configuración de Hartree-Fock para los modelos de apareamiento reducido (a) $\mathcal{H}_1$ y (b) $\mathcal{H}_2$ , donde $\epsilon_F$ es la energía de Fermi y se escoge $N = N_0 = 10$ . . . . .	59
5.2.	(a) Energía de condensación (en unidades de $d$ ) como función de la intensidad de la interacción de apareamiento (en términos del parámetro $\chi = G(N_0 - 1)/(2d)$ ) para las aproximaciones BCS (línea fina de puntos), VAP (línea continua), PAV (línea gruesa de puntos), RVAP <sub>1</sub> (línea de puntos y rayas), LN (círculos) y RVAP <sub>2</sub> (triángulos). Las líneas verticales indican los valores de $\chi$ para los que se hace un análisis detallado de los métodos RVAP <sub>1</sub> , LN, PLN y RVAP <sub>2</sub> (b) Diferencias normalizadas con respecto de la solución VAP para las distintas aproximaciones. . . . .	61
5.3.	Superficies de energía como función de las fluctuaciones en el número de partículas para las aproximaciones BCS (línea de puntos, CBCS) y su proyección a buen número de partículas (línea continua, PCBCS). Los mínimos de dichas curvas corresponden a la solución BCS y PAV(cuadrado). En el panel (a) se muestran los resultados para un valor de $\chi = 1.1$ en la región normal-conductora mientras que en el panel (b) el valor de $\chi = 1.9$ está en la región superconductora. La línea horizontal marca el valor de la solución VAP en cada caso. El mínimo de la curva proyectada es la solución RVAP <sub>1</sub> (círculo negro). Además, se representa la energía proyectada aproximada a segundo orden en la expansión de Kamlah (línea discontinua) que contiene a la solución de Lipkin-Nogami autoconsistente (círculo blanco, LN). . . . .	63

- 5.4. Superficies de energía en la aproximación de campo medio (CBCS, línea de puntos) y proyectada (PCBCS, línea continua) como función de  $\Delta N^4$  para  $\chi=1.1$  y  $\Delta N^2=1.6$  (a) y  $\chi=1.9$  y  $\Delta N^2=3.4$  (b). Las líneas verticales indican el valor del mínimo de la curvas CBCS cuya proyección dan la soluciones RVAP<sub>1</sub> (círculos). Los mínimos de las curvas PCBCS son las soluciones RVAP<sub>2</sub> (triángulos) . . . . . 65
- 5.5. Superficies de energía proyectadas como función de  $\Delta N^2$  para  $\chi=1.1$  (a) y  $\chi=1.9$  (b). La línea de puntos se corresponde con la PCBCS de la figura 5.3 cuyo mínimo es la solución RVAP<sub>1</sub> (círculo) mientras que la línea continua se halla seleccionando los mínimos en la dirección  $\Delta N^4$  para valores fijos de  $\Delta N^2$ . El mínimo de esta curva es la aproximación RVAP<sub>2</sub> (triángulos). La solución VAP se representa por la línea horizontal discontinua. . . . . 66
- 5.6. Energía de condensación (en unidades de  $d$ ) como función de la intensidad de la interacción de apareamiento (en términos del parámetro  $\chi = G(N_0 - 1)/(2d)$ ) para la aproximación VAP (línea continua) y resultado exacto (puntos) . . . . . 67
- 5.7. Equivalente a la figura 5.2 pero con el hamiltoniano de dos niveles. . . . . 68
- 5.8. Superficies de energía como función de las fluctuaciones en el número de partículas para las aproximaciones BCS(línea de puntos, CBCS) y su proyección a buen número de partículas (línea continua, PCBCS) y para un valor de  $\chi = 0.8$ . El mínimo de la curva proyectada es la solución RVAP<sub>1</sub>=VAP (círculo negro). Además, se representa la energía proyectada aproximada a segundo orden en la expansión de Kamlah (línea discontinua) que contiene a la solución de Lipkin-Nogami autoconsistente (círculo blanco, LN). La proyección de este punto da la energía en la aproximación PLN (diamante). . . . . 69
- 5.9. Valores del parámetro  $h_2$  del método de LN (ec. 5.40) y del multiplicador de Lagrange  $\lambda_{\Delta N^2}$  del método RVAP<sub>1</sub> (ec. 5.45) en función de  $\Delta N^2$  para (a) el modelo de múltiples niveles  $\mathcal{H}_1$  con  $\chi = 1.1$  y (b) el modelo de dos niveles  $\mathcal{H}_2$  con  $\chi = 0.8$  . . . 70

- 5.10. (a) Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$  calculadas con distintas aproximaciones: VAP (línea continua), RVAP<sub>1</sub> (círculos), PLN (líneas y puntos) y PAV (línea discontinua) para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Además, se muestra la superficie sin proyectar correspondiente a la solución HFB (línea de puntos). El cero de energía se corresponde con el mínimo en la aproximación VAP. (b) Normas proyectadas de los estados intrínsecos para las distintas funciones de onda intrínsecas. Además se muestra la norma sin proyectar que en todos los casos vale uno (línea de puntos). . . . . 71
- 5.11. Superficies de energía potencial en función de  $(\Delta N^2, \Delta Z^2)$  (a) en la aproximación de HFB (CHFB) y (b) proyectada a buen número de partículas (PCHFB). El cero de energía en los dos casos está normalizado al valor del mínimo de la superficie proyectada (solución RVAP<sub>1</sub>). Los contornos indican diferencias de 0.01 MeV. El valor de  $q_{20}$  es 0.6 (b). . . . . 72
- 5.12. Energías de partícula independiente del núcleo  $^{54}\text{Cr}$  ((a) protones, (b) neutrones). Las líneas continuas indican estados de paridad positiva mientras que las discontinuas representan estados de paridad negativa. Energías de apareamiento proyectadas ((c) protones, (d) neutrones) en las distintas aproximaciones: VAP (línea continua), RVAP<sub>1</sub> (círculos), PLN (líneas y puntos) y PAV (línea discontinua). El nivel de Fermi está representado por las líneas discontinuas gruesas ((a) y (b)) . . . 73
- 6.1. Norma y energía (normalizada) proyectadas simultáneamente a buen número de partículas y momento angular ( $J = 0$  azul,  $J = 2$  rojo,  $J = 4$  verde y  $J = 6$  magenta) en función de la deformación cuadrupolar axial  $q_{20}$  con funciones de onda intrínsecas (a)-(d) HFB, (b)-(e) LN y (c)-(f) VAP para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . En línea discontinua se muestra la superficie proyectada a buen número de partículas en cada caso, PAV (HFB), PLN(LN) y VAP. Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la superficie con  $J = 0$  calculada con funciones de onda VAP. . . . . 90

6.2.	(a) Energía (normalizada), (b) norma, (c) número de protones y (d) número de neutrones, calculados con funciones de onda proyectadas a buen momento angular ( $J = 0$ azul, $J = 2$ rojo, $J = 4$ verde y $J = 6$ magenta) en función de la deformación cuadrupolar axial $q_{20}$ con funciones de onda intrínsecas HFB para el núcleo $^{54}\text{Cr}$ . Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la superficie con $J = 0$ calculada con funciones de onda VAP. . . . .	93
6.3.	Matrices de solapes de la norma (panel de la izquierda) y de la energía (panel de la derecha) proyectadas a buen número de partículas y momento angular ( $J = 0$ panel superior, $J = 2$ panel inferior) calculadas con funciones de onda intrínsecas VAP en el núcleo $^{54}\text{Cr}$ . Las curvas de energía están normalizadas al valor del mínimo de la diagonal con $J = 0$ . Las curvas de nivel se diferencian en 0.01 unidades en el caso de la norma y de 1 MeV en el caso de la energía. . . . .	98
6.4.	Energía GCM en función del número de autovalores de la norma, ordenados de mayor a menor, que se usan en la base natural calculados para distintos valores del momento angular ( $J = 0; \sigma = 0$ azul, $J = 2; \sigma = 0$ rojo, $J = 4; \sigma = 0$ verde y $J = 6; \sigma = 0$ magenta) y con funciones de onda intrínsecas que se proyectan simultáneamente a buen número de partículas y momento angular (a) LN y (b) VAP. En el panel inferior (c)-(d) se muestra el logaritmo decimal de los autovalores de la matriz de los solapes de la norma correspondientes a cada caso. . . . .	100
6.5.	Espectro de excitación calculado con el método del generador de coordenadas con funciones de onda intrínsecas (a) LN y (b) VAP, para el núcleo $^{54}\text{Cr}$ . Además, se muestran las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular en función de la deformación cuadrupolar axial. Los puntos calculados se sitúan en el valor medio de la deformación cuadrupolar. El origen de las energías es el valor del estado fundamental $0_0$ calculado con el método GCM con funciones VAP. . . . .	101

- 6.6. Funciones de onda colectivas (ec. 6.51) de los niveles *yrast* (líneas continuas) y *yrare* (líneas de puntos) calculadas con funciones de onda intrínsecas VAP (panel superior) y LN (panel inferior) en función de la deformación cuadrupolar intrínseca  $q_{20}$  para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Además, se representan las superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas). Los valores de las energías están normalizados al valor del estado fundamental  $0_0$  calculado con el método GCM con funciones VAP. . . . . 103
- 6.7. Energías de excitación de la banda *yrast* calculadas con el método GCM con funciones de onda intrínsecas VAP (círculos azules) y LN (círculos rojos) comparadas con los datos experimentales (círculos negros) [20] para el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . . . . 104
- 6.8. (a) Energía, (c) número de protones y (d) número de neutrones GCM en función del número de autovalores de la norma que se usan en la base natural calculados para distintos valores del momento angular ( $J = 0; \sigma = 0$  azul,  $J = 2; \sigma = 0$  rojo,  $J = 4; \sigma = 0$  verde y  $J = 6; \sigma = 0$  magenta) y con funciones de onda intrínsecas HFB que se proyectan sólo a buen momento angular. En (b) se muestran los autovalores de la matriz de los solapes de la norma correspondientes. . . . . 105
- 7.1. Energías de partícula independiente efectivas de neutrones (ESPE's) en función del número de neutrones para los isótopos del (a) calcio, (b) titanio, (c) cromo, (d) hierro y (e) níquel, calculadas con la interacción GXPF1. Los símbolos indican que la órbita está ocupada por al menos una partícula en la configuración normal de llenado. La figura está extraída de la referencia [24] . . . . . 113
- 7.2. Energías de excitación experimentales (líneas) y calculadas con el modelo de capas con la interacción GXPF1 (puntos) y KB3G (cruces) para los isótopos del calcio, cromo y titanio. La figura está extraída de la referencia [8] . . . . . 116
- 7.3. Probabilidades de transición reducidas  $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  experimentales (puntos) y calculadas con el modelo de capas con la interacción GXPF1 (cuadrados rojos) y KB3G (diamantes azules) para los isótopos del calcio, cromo y titanio, con cargas efectivas (a)  $q_\pi = 1.5e$ ,  $q_\nu = 0.5e$  y (b)  $q_\pi = 1.15e$ ,  $q_\nu = 0.8e$ . La figura está extraída de la referencia [26] . . . . . 117

7.4.	Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas obtenidas con funciones intrínsecas VAP como función del momento cuadrupolar axial para los isótopos del calcio (parte superior), titanio (parte central) y cromo (parte inferior). Las curvas están normalizadas para tener el mismo valor de la energía en $q_{20} = 0$ (b) y se han desplazado 1, 4 y 6 MeV las superficies del calcio, titanio y cromo respectivamente para una mejor visualización. . . . .	118
7.5.	Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del (a)-(d) calcio, (b)-(e) titanio y (c)-(f) cromo. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28] . . . . .	119
7.6.	Energías de excitación del primer estado $2^+$ experimental (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas para los isótopos del (a) Ca, (b) Ti y (c) Cr. Los círculos azules se corresponden con los resultados obtenidos a partir de los cálculos mientras que los cuadrados negros se obtienen multiplicando dichos resultados por un factor corrector (véase el texto para más detalles). . . . .	121
7.7.	Probabilidades de transición reducidas para los isótopos de calcio, titanio y cromo. Los datos experimentales están tomados de las referencias [22, 23]. . . . .	123
7.8.	Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del cromo. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28] . . . . .	125
7.9.	(a) Energías de excitación de los primeros estados $2^+$ , $4^+$ y (b) Probabilidades de transición reducidas experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas (puntos azules) para los isótopos del Cr. Los datos experimentales están tomados de las referencias [12, 13, 32, 23, 34] . . . . .	126
7.10.	Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas) y funciones de onda colectivas (líneas continuas) de los estados ( $J = 0, \sigma = 0$ (azul)), ( $J = 2, \sigma = 0$ (rojo)) y ( $J = 4, \sigma = 0$ (verde)) para los núcleos $^{50-66}\text{Cr}$ . Las energías están normalizadas al valor del estado fundamental ( $J = 0, \sigma = 0$ ) de cada núcleo. . . . .	128

7.11.	Energías de partícula independiente de protones (izquierda) y neutrones (derecha) calculadas en la aproximación de HFB para el núcleo $^{66}\text{Cr}_{40}$ en función del momento cuadupolar axial. Las líneas continuas se corresponden con estados de paridad positiva mientras que las discontinuas con estados de paridad negativa. La línea roja de puntos es el nivel de Fermi. . . . .	130
7.12.	Energías de ligadura por partícula y energías de separación de dos neutrones experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas (círculos azules) para los isótopos del silicio. Los datos experimentales están tomados de la referencia [28] . . . . .	131
7.13.	(a) Energías de excitación de los primeros estados $2^+$ y (b) Probabilidades de transición reducidas experimentales (puntos rojos) y calculadas con el generador de coordenadas (puntos azules) para los isótopos del Si. Los datos experimentales están tomados de las referencias [35, 6] . . . . .	132
7.14.	Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas), funciones de onda colectivas (líneas continuas) y energías (puntos) de los estados ( $J = 0, \sigma = 0$ (azul)) y ( $J = 2, \sigma = 0$ (rojo)) para los núcleos $^{32-42}\text{Cr}$ . Las energías están normalizadas al valor del estado fundamental ( $J = 0, \sigma = 0$ ) de cada núcleo y su posición indica el valor promedio de la deformación en cada estado. . . . .	133
8.1.	Triángulo de Casten extendido a deformaciones obladas. El triángulo original lo forman los vértices U(5), SU(3), O(6). La línea verde corresponde con la trayectoria puramente axial para la transición oblado-prolado mientras que la roja es la propuesta en este trabajo. . . . .	142
8.2.	(a)-(f) Potencial $V(\beta, \gamma)$ (ec. 8.1) dado por el modelo colectivo para la transición U(5)-SU(3) con distintos valores del parámetro de control $\zeta$ . Las líneas de contorno representan un salto de 0.05 unidades arbitrarias y el cero de energía de las superficies se corresponde con el mínimo. Además se representan los valores del potencial correspondientes a la trayectoria axial $\gamma = 0^\circ, 60^\circ$ , éstos sin normalizar. . . . .	144

8.3.	(a)-(f) Superficies de energía potencial en el plano $(\beta, \gamma)$ proyectadas a buen número de partículas calculadas con funciones de onda VAP con la interacción de Gogny D1S para los isótopos del neodimio $^{144-154}_{60}\text{Nd}$ . Las líneas de contorno representan un salto de 1 MeV y el cero de energía de las superficies se corresponde con el mínimo. Además se representan los valores del potencial correspondientes a la trayectoria axial $\gamma = 0^\circ, 60^\circ$ donde se ha elegido el cero de energía en el valor correspondiente a $\beta = 0$ . . . . .	146
8.4.	Superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas y momento angular (líneas discontinuas) y funciones de onda colectivas (líneas continuas) a lo largo de la deformación cuadupolar axial ( $\beta$ ) para $J = 0$ (panel inferior), $J = 2$ (panel central) y $J = 4$ panel (superior) calculadas para los isótopos $^{144-148}\text{Nd}$ . El cero de energía se corresponde con el valor de la energía para el estado $J = 0, \sigma = 0$ de cada núcleo. . . . .	149
8.5.	<i>Ídem</i> figura 8.4 pero para los isótopos $^{150-154}\text{Nd}$ . . . . .	150
8.6.	(a) Cociente entre las energías de los primeros estados $4^+, 2^+$ . (b) Probabilidad de transición cuadupolar reducida entre el primer estado $2^+$ y el fundamental para los isótopos $^{144-154}\text{Nd}$ . Los círculos azules corresponden con los valores teóricos mientras que los puntos rojos con los experimentales. Éstos últimos están extraídos de las referencias [21, 16]. . . . .	151
8.7.	Energías de excitación normalizadas $E(J_1^+)/E(2_1^+)$ para los isótopos $^{144-154}\text{Nd}$ . Los datos teóricos y experimentales están representados con círculos azules y puntos rojos respectivamente. Además, para los núcleos $^{144}\text{Nd}$ , $^{150}\text{Nd}$ y $^{154}\text{Nd}$ se muestran las predicciones de los modelos U(5), X(5), SU(3) respectivamente (cuadrados negros). Nótese el cambio de escala entre el panel superior e inferior. . . . .	153
8.8.	Energías de excitación normalizadas $E(J_1^+)/E(2_1^+)$ para el isótopo $^{148}\text{Nd}$ calculadas con el método del generador de coordenadas con la interacción de Gogny usando sólo la parte prolada (puntos morados) y permitiendo la mezcla de la parte oblada y prolada como en los cálculos estándar (puntos azules). Además se muestran la predicción del modelo X(5) (cuadrados negros) y los datos experimentales (círculos rojos). . . . .	155



# Índice de tablas

2.1. Espacios de valencia e interacciones efectivas correspondientes empleadas en los cálculos actuales del Modelo de Capas. Tabla adaptada de Refs. [20, 21, 23] . . . . .	13
3.1. Distintas familias de parametrizaciones de la interacción de Skyrme usadas en la literatura. Tabla adaptada de Ref. [12] .	20
3.2. Valores de los parámetros para las distintas parametrizaciones de la interacción de Gogny usadas en la literatura. . . . .	23
3.3. Distintas densidades lagrangianas y respectivas parametriza- ciones usadas en los modelos RMF. IM+TNL=intercambio de mesones con términos no lineales; IM+ADD=intercambio de mesones con acoplamientos dependientes de la densidad; IC=interacción de contacto . . . . .	26
5.1. Resumen de las distintas aproximaciones que se usan para re- solver los hamiltonianos de apareamiento reducidos . . . . .	60